

量子力学自测题 (1)

一、简答与证明：(共 25 分)

- 1、什么是德布罗意波？并写出德布罗意波的表达式。(4分)
- 2、什么样的状态是定态，其性质是什么？(6分)
- 3、全同费米子的波函数有什么特点？并写出两个费米子组成的全同粒子体系的波函数。(4分)
- 4、证明 $i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2)$ 是厄密算符 (5分)
- 5、简述测不准关系的主要内容，并写出坐标 x 和动量 $\hat{p}_x$ 之间的测不准关系。(6分)

二、(15 分) 已知厄密算符 $\hat{A}, \hat{B}$ ，满足 $\hat{A}^2 = \hat{B}^2 = 1$ ，且 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ ，求

- 1、在 A 表象中算符 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ 的矩阵表示；
- 2、在 B 表象中算符 $\hat{A}$ 的本征值和本征函数；
- 3、从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵 S。

三、(15 分) 设氢原子在 $t=0$ 时处于状态

$$\psi(r,0) = \frac{1}{2} R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}} R_{31}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{1-1}(\theta, \varphi), \text{ 求}$$

- 1、 $t=0$ 时氢原子的 E 、 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的取值几率和平均值；
- 2、 $t>0$ 时体系的波函数，并给出此时体系的 E 、 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的取值几率和平均值。

四、(15 分) 考虑一个三维状态空间的问题，在取定的一组正交基下

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & C & 0 \\ C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix}$$

哈密顿算符由下面的矩阵给出

这里， $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'$ ， C 是一个常数， $C \ll 1$ ，用微扰公式求能量至二级修正值，并与精确解相比较。

五、(10 分) 令 $S_+ = S_x + iS_y$ ， $S_- = S_x - iS_y$ ，分别求 S_+ 和 S_- 作用于 S_z 的

本征态 $\left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 的结果，并根据所得的结果说明 S_+ 和 S_- 的重要性是什么？

量子力学自测题 (2)

一、填空题 (本题 20 分)

1. 在量子力学中, 体系的量子态用 Hilbert 空间中的_____来描述, 而力学量用_____描述。力学量算符必为_____算符, 以保证其_____为实数。当对体系进行某一力学量的测量时, 测量结果一般来说是不确定的。测量结果的不确定性来源于_____。
2. 在量子力学中, 一个力学量是否是守恒量只决定于_____的性质, 也就是说, 决定于该力学量是否与体系的_____对易, 而与体系的_____无关。一个力学量是否具有确定值, 只决定于体系的_____, 也就是说, 决定于体系是否处于该力学量的_____, 无论该力学量是否守恒量。

二、(本题 15 分)

1. 设全同二粒子的体系的 Hamilton 量为 $\hat{H}(1, 2,)$, 波函数为 $\psi(1, 2,)$, 试证明交换算符 $\hat{P}_{12}$ 是一个守恒量。

2. 设 $\hat{U}$ 是一个么正算符, 求证 $\hat{H} = i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} \cdot \hat{U}^+$ 是厄米算符。

3. 设 σ_y 为 Pauli 矩阵,

(1) 求证: $e^{i\theta\sigma_y} = \cos\theta + i\sigma_y \sin\theta$

(2) 试求: $\text{Tr} e^{i\theta\sigma_y}$

三、(本题 10 分)

求证: $\psi(xyz) = x + y + z$ 是角动量平方算符 $\hat{l}^2$ 的本征值为 $2\hbar^2$ 的本征函数。

四、(本题 15 分)

设一量子体系处于用波函数 $\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}(e^{i\varphi} \sin \theta + \cos \theta)$ 所描述的

量子态。

求：(1) 在该态下， $\hat{l}_z$ 的可能测值和各个值出现的几率。

(2) $\hat{l}_z$ 的平均值。

如有必要可利用， $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ ， $Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$ 。

五、(本题 20 分)

已知，在一维无限深方势阱中运动粒子的能量本征值和本征函数

分别为 $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$ ， $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ ， $(n=1, 2, 3\cdots)$

设粒子受到微扰： $\hat{H}'(x) = \begin{cases} \frac{2k}{a}x, & 0 < x < \frac{a}{2} \\ \frac{2k}{a}(a-x), & \frac{a}{2} < x < a \end{cases}$

求基态 ($n=1$) 能量的一级近似值。

如有必要，可利用积分公式 $\int y \cos y dy = \cos y + y \sin y$ 。

六、(本题 20 分)

设 $|n\rangle (n=1,2,3,\dots)$ 表示一维谐振子的能量本征态，且已知

$$x|n\rangle = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} |n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} |n-1\rangle \right], \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

(1) 求矩阵元 $\langle m|x^2|n\rangle$ 。

(2) 设该谐振子在 $t=0$ 时处于基态 $|0\rangle$ ，从 $t>0$ 开始受微扰 $H' = x^2 e^{-2kt}$ 的作用。

求：经充分长时时 ($t \rightarrow \infty$) 以后体系跃迁到 $|2\rangle$ 态的几率。

量子力学自测题 (3)

一、简答题 (每小题 5 分, 共 40 分)

1. 一粒子的波函数为 $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$, 写出粒子位于 $x \sim x + dx$ 间的几率。
2. 粒子在一维 δ 势阱 $V(x) = -\gamma\delta(x)$, ($\gamma > 0$), 中运动, 波函数为 $\psi(x)$, 写出 $\psi'(x)$ 的跃变条件。
3. 量子力学中, 体系的任意态 $\psi(x)$ 可用一组力学量完全集的共同本征态 $\psi_n(x)$ 展开: $\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$, 写出展开式系数 c_n 的表达式。
4. 给出如下对易关系: $[z, p_z] = ?$ $[x, p_y] = ?$ $[L_x, L_z] = ?$
 $[s^2, s_x] = ?$ $[\sigma_z, \sigma_y] = ?$
5. 一个电子运动的旋量波函数为 $\psi(\vec{r}, s_z) = \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}, \hbar/2) \\ \psi(\vec{r}, -\hbar/2) \end{pmatrix}$, 写出表示电子自旋向上、位置在 $\vec{r}$ 处的几率密度表达式, 以及表示电子自旋向下的几率的表达式。
6. 何谓几率流密度? 写出几率流密度 $\vec{j}(\vec{r}, t)$ 的表达式。
7. 散射问题中, 高能粒子散射和低能粒子散射分别宜采用什么方法处理?
8. 一维运动中, 哈密顿量 $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, 求 $[x, H] = ?$ $[p, H] = ?$

二、计算题 (共 60 分。9—11 题各 10 分; 12、13 题各 15 分)

9. 在时间 $t = 0$ 时, 一个线性谐振子处于用下列归一化的波函数所描

写的状态: $\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{5}}u_0(x) + \sqrt{\frac{1}{2}}u_2(x) + c_3u_3(x)$

式中 $u_n(x)$ 是振子的第 n 个本征函数。

(1) 试求 c_3 的数值；(2) 写出在 t 时刻的波函数；

(3) 在 $t=0$ 时振子能量的期望值是多少？ $t=1$ 秒时呢？

10. $|n\rangle$ 为 L_z 的本征态，本征值为 $n\hbar$ 。求在 L_z 的本征态 $|n\rangle$ 下， L_x 和 L_y 的平均值。

11. 氢原子处于状态 $\psi(\vec{r}, s_z) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} R_{21} Y_{11} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} R_{21} Y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$,

(1) 求轨道角动量的 z 分量 L_z 的平均值；

(2) 求自旋角动量的 z 分量 s_z 的平均值；

(3) 求总磁矩 $\vec{M} = -\frac{e}{2\mu} \vec{L} - \frac{e}{\mu} \vec{s}$ 的 z 分量 M_z 的平均值。

12. $\vec{s}$ 、 $\vec{L}$ 分别为电子的自旋和轨道角动量， $\vec{J} = \vec{s} + \vec{L}$ 为电子的总角动量。证明： $[\vec{J}, \vec{s} \cdot \vec{L}] = 0$ ； $[J^2, J_\alpha] = 0$ ， $\alpha = x, y, z$ 。

13. 质量为 μ 的粒子受微扰后，在一维势场中运动，

$$V(x) = \begin{cases} A \cos \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & x < 0, x > a \end{cases}$$

(1) 题中应当把什么看作微扰势？

(2) 写出未受微扰时的能级和波函数；

(3) 用微扰论计算基态能量到二级近似，其中 $A = \frac{\pi^2 \hbar^2}{10\mu a^2}$ 。

量子力学自测题 (4)

一、(共 25 分)

- 1、厄密算符的本征值和本征矢有什么特点？(4 分)
- 2、什么样的状态是束缚态、简并态和偶宇称态？(6 分)
- 3、全同玻色子的波函数有什么特点？并写出两个玻色子组成的全同粒子体系的波函数。(4 分)
- 4、在一维情况下，求宇称算符 $\hat{P}$ 和坐标 x 的共同本征函数。(6 分)
- 5、简述测不准关系的主要内容，并写出时间 t 和能量 E 的测不准关系。(5 分)

二、(15 分) 已知厄密算符 $\hat{A}, \hat{B}$ ，满足 $\hat{A}^2 = \hat{B}^2 = 1$ ，且 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ ，求

- 1、在 A 表象中算符 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ 的矩阵表示；
- 2、在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的本征值和本征函数；
- 3、从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵 S。

三、(15 分) 线性谐振子在 $t=0$ 时处于状态

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \left[\sqrt{\frac{1}{3}} - \frac{2}{\sqrt{3}} \alpha x \right] \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right), \text{ 其中 } \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \text{ 求}$$

- 1、在 $t=0$ 时体系能量的取值几率和平均值。
- 2、 $t>0$ 时体系波函数和体系能量的取值几率及平均值

四、(15 分) 当 λ 为一小量时，利用微扰论求矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 2\lambda & 0 \\ 2\lambda & 2+\lambda & 3\lambda \\ 0 & 3\lambda & 3+2\lambda \end{pmatrix}$$

的本征值至 λ 的二次项，本征矢至 λ 的一次项。

五、(10 分) 一体系由三个全同的玻色子组成，玻色子之间无相互作用。玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个？它们的波函数怎样用单粒子波函数构成？

量子力学自测题 (5)

一、 填空题 (本题 20 分)

1. Planck 的量子假说揭示了微观粒子_____特性, Einstein 的光量子假说揭示了光的_____性。Bohr 的氢原子理论解决了经典电磁场理论和原子的_____之间的矛盾, 解决了原子的起源问题。

2. 力学量算符必须是_____算符, 以保证它的本征值为_____。

对一个量子体系进行某一力学量的测量时, 所得到的测量值肯定是_____当中的某一个, 测量结果一般来说是不确定的, 除非体系处于_____。测量结果的不确定性来源于_____。两个力学量同时具有确定值的条件是_____。

二、 (本题 15 分)

1. 设算符 $\hat{a}$ 具有性质 $\hat{a}^2 = 0, \{\hat{a}, \hat{a}^+\} = 1$ 。求证:

(1) $\hat{N} \equiv \hat{a}^+ \hat{a}$ 本征值必为实数。

(2) $\hat{N}^2 = \hat{N}$

(3) $\hat{N}$ 的本征值为 0 或者 1。

2. 利用对易式 $\sigma \times \sigma = 2i\sigma$, 求证: $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0, (i, j = x, y, z)$, 其中, σ_i, σ_j 为 Pauli 矩阵。

三、 (本题 15 分)

1. 设氦原子中的两个电子都处于 1s 态, (不简并) 两个电子体系的空间波函数为 $\psi(r_1, r_2) = \psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2)$

(1) 写出两个电子体系的四个可能的自旋波函数 $\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4$ 。

(2) 写出对两个电子的交换反对称的总体波函数 $\varphi(r_1, r_2, s_{1z}, s_{2z})$ (同时考虑空间自由度和自旋自由度)。

2. 一电子处于自旋态 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle)$, 求:

(1) 在自旋态 $|\psi\rangle$ 下, $\hat{S}_z$ 的可能测值与相应的几率。

(2) 在自旋态 $|\psi\rangle$ 下, $\hat{S}_x$ 的可能测值与几率。

四、(本题 15 分)

设一个类氢离子的电荷数由 Z 变成 $Z+1$, 试用微扰方法计算基态能量的一级近似值。已知: 类氢离子的基态能量本征值和本征函数分别为

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a}, \quad \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a}}, \quad \text{计算时, 可利用积分公式}$$

$$\int_0^\infty x e^{-2\alpha x} dx = \frac{1}{4\alpha^2}。$$

五、(本题 20 分)

设一维谐振子的能量本征函数为 $\psi_n(x)$, 求:

(1) 动量 $\hat{p}$ 在 $\psi_n(x)$ 态下的平均值。

(2) 动能 $\hat{T}$ 在 $\psi_n(x)$ 态下的平均值。如有必要, 可以利用

$$\frac{d}{dx} \psi_n(x) = \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

六、(本题 15 分) 设一量子体系的 Hamilton 量为 $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & a_1 & a_2 \\ a_1^* & E_2 & a_3 \\ a_2^* & a_3^* & E_3 \end{pmatrix}$

而且, $|a_1|^2, |a_2|^2, |a_3|^2 \ll 1$, 试利用微扰法计算体系能量的一, 二级修正值。

量子力学自测题 (6)

一、填空题 (本题 18 分)

自由粒子的能量算符 $\hat{H} = \underline{\hspace{2cm}}$ ，它是 $\underline{\hspace{2cm}}$ 量。 $\psi = \cos kx$ 是自由粒子能量算符的本征值为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 的本征函数，它是平面单色波和 $\underline{\hspace{2cm}}$ 的叠加态，在该态下， $\underline{\hspace{2cm}}$ 具有确定值，但 $\underline{\hspace{2cm}}$ 不具有确定值，它的可能测值是或 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

二、(本题 12 分)

在下列两种情况下，求一维运动粒子的动量平均值 $\bar{p}$ ：

(1) 波函数 $\psi(x)$ 是实函数。

(2) 波函数 $\psi(x) = \psi(x) e^{ik_0 x}$ ，其中 $\psi(x)$ 是归一化的实函数， k_0 是实常数。

三、(本题 10 分)

在氯化钠晶体内有些负离子空穴，每个空穴束缚一个电子，因此可将这些电子看成束缚在边长为晶格常数的立方体内的粒子。设在室温下电子处于基态，求处于基态的电子吸收电磁波跃迁到第一激发态时，所吸收电磁波的波长。

四、(本题 10 分)

一个电子在 $t=0$ 时，观测到自旋沿 z 轴正向。问在 $t>0$ 时电子的自旋方向在 $x-z$ 平面内与 z 轴成 $\theta \left(\theta < \frac{\pi}{2} \right)$ 角的几率是多少？

五、(本题 15 分)

设一个置于中心力场中的粒子，其轨道角动量量子数 $l=2$ ，自旋角动

量量子数 $s=1$ 。体系的自旋-轨道相互作用 Hamilton 量为 $\hat{H} = A\hat{L} \cdot \hat{S}$ (A 为常数), 体系的能级和各个能级的简并度。

六、(本题 15 分)

阱宽为 a 的一维无限深对称方势阱中 $\left(-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}\right)$ 运动粒子的能量本

征值和本征函数分别为 $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$, $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a}$, $n=1, 3, 5, \dots$

(只考虑偶宇称态)

设阱内粒子处于状态 $\psi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} [(a/2)^2 - x^2]$

(1) 求粒子处于各个能量本征态的几率。

(2) 利用所求得的几率, 求体系的能量平均值。

如有必要可利用: $\frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \dots = \frac{\pi^4}{96}$,

$$\int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos \frac{n\pi x}{a} dx = (-1)^{(n-1)/2} \left(\frac{a^3}{2n\pi} - \frac{4a^3}{n^3\pi^3} \right), \quad n=1, 3, 5, \dots$$

七、(本题 20 分)

一根长为 l 的细绳 (忽略它的质量) 的一端固定, 另一端系一质量为 m 的质点, 在重力的作用下, 质点在竖直平面内小角摆动 (简谐振动)。

用量子力学方法

(1) 求质点的简谐振动能级 (势能项关于摆动角 θ 的展开式取到 θ^2 项)。

(2) 把小角近似带来的误差作为微扰, 计算质点基态能量的一级近似值 (把势能的 θ^4 项当作微扰计算)。

量子力学自测题 (7)

一、(共 25 分)

- 1、厄密算符的本征值和本征矢有什么特点？(4 分)
- 2、什么样的状态是束缚态、简并态和偶宇称态？(6 分)
- 3、全同玻色子的波函数有什么特点？并写出两个玻色子组成的全同粒子体系的波函数。(4 分)
- 4、在一维情况下，求宇称算符 $\hat{P}$ 和坐标 x 的共同本征函数。(6 分)
- 5、简述测不准关系的主要内容，并写出时间 t 和能量 E 的测不准关系。(5 分)

二、(15 分) 已知厄密算符 $\hat{A}, \hat{B}$ ，满足 $\hat{A}^2 = \hat{B}^2 = 1$ ，且 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ ，求

- 1、在 A 表象中算符 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ 的矩阵表示；
- 2、在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的本征值和本征函数；
- 3、从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵 S。

三、(15 分) 线性谐振子在 $t=0$ 时处于状态

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \left[\sqrt{\frac{1}{3}} - \frac{2}{\sqrt{3}} \alpha x \right] \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right), \text{ 其中 } \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \text{ 求}$$

- 1、在 $t=0$ 时体系能量的取值几率和平均值。
- 2、 $t>0$ 时体系波函数和体系能量的取值几率及平均值

四、(15 分) 当 λ 为一小量时，利用微扰论求矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 2\lambda & 0 \\ 2\lambda & 2+\lambda & 3\lambda \\ 0 & 3\lambda & 3+2\lambda \end{pmatrix}$$

的本征值至 λ 的二次项，本征矢至 λ 的一次项。

- ### 五、(10 分) 一体系由三个全同的玻色子组成，玻色子之间无相互作用。玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个？它们的波函数怎样用单粒子波函数构成？

量子力学自测题 (8)

一、填空题 (本题 25 分)

1. 自由粒子平面波函数 $\psi(x) = ce^{ikx}$ 的动量不确定度 $\Delta p =$ _____, 坐标不确定度 $\Delta x =$ _____。

2. 波函数 $\psi(x) = \cos kx$ 是否自由粒子的能量本征态? 答: _____。如果是, 能量本征值是 _____。该波函数是否是动量本征态? 答: _____, 因为 _____。

3. 设 $\hat{A}\hat{B}$ 是两个互为不对易的厄米算符。在下列算符

(1) $\hat{A}, \hat{B}$; (2) $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$; (3) $\hat{A}^2$; (4) $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

中, 算符 _____ 和 _____ 的本征值必为实数。

4. 设两个电子散射波的自旋波函数 $\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, 则散射波的空间波函数应为 _____。因此微分散射截面 _____。

5. 设一个二能级体系的两个能量本征值分别为 E_1 和 E_2 , 相应的本征矢量为 $|n_1\rangle$ 和 $|n_2\rangle$ 。则在能量表象中, 体系 Hamilton 量的矩阵表示是 _____, 体系的可能状态是 _____, 在各可能状态下, 能量的可能测值是 _____, 相应的几率是 _____。

二、(本题 15 分)

1. 已知在坐标表象中, 自由粒子的坐标本征函数为 $\psi(x) = \delta(x - x_0)$ 求在动量表象中坐标的本征函数。

2. 氢原子中的电子在径向坐标 $r \rightarrow r + dr$ 的球壳内出现的几率为

$P_{nl}(r)dr = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$ 。已知, $R_{10}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$, 求 1S 电子的径向几

率最大的位置。

三、(本题 15 分)

1. 求证: $\psi_1 = y + iz$, $\psi_2 = z + ix$, $\psi_3 = x + iy$ 分别为角动量算符 $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ 的本征值为 $\hbar$ 的本征态。

2. 试证明: 在电子的任意自旋态 $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ 下, 只要 $|a|^2 = |b|^2$, 则自旋角动量 $\hat{S}_z$ 的平均值必为零。

四、(本题 15 分)

1. 已知 $(\sigma \cdot A)(\sigma \cdot B) = A \cdot B + i\sigma \cdot (A \times B)$, 其中, A, B 为与 Pauli 矩阵 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 对易的任意两个矢量算符。试证明: $(\sigma \cdot \hat{p})^2 = p^2$, $(\sigma \cdot l)^2 = l^2 - \hbar \sigma \cdot l$ 其中, p 为三维动量, l 为三维角动量。

2. 设力学量 $\hat{A}$ (不显含时间) 为守恒量。求证: $\hat{A}$ 的平均值不随时间改变, 即 $\frac{d\bar{A}}{dt} = 0$

五、(本题 15 分)

已知一维谐振子处于基态, 坐标的不确定度 $\Delta x = \sqrt{(x + \bar{x})^2} = l$ 求该谐振子跃迁到第一激发态所需能量。

六、(本题 15 分)

设一电子在沿 x 方向的均匀磁场 B 中运动。在 $t=0$ 时, 电子的自旋向 z 轴的正向极化。求: (1) 在任意时刻 t , 电子的自旋波函数。

(2) $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ 的平均值。

(3) $\hat{S}_z$ 的测值为 $\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 的几率。

量子力学自测题 (9)

一. 回答下列问题 (共 30 分, 第 1、2 小题各 10 分, 第 3、4 小题各 5 分)

1、下列波函数所描写的状态是否为定态? 并说明其理由。

$$(1)、\psi_1(x,t) = \varphi(x)e^{i\frac{E}{\hbar}t} + \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$(1)、\psi_2(x,t) = u(x)e^{i(x-\frac{E}{\hbar}t)} + v(x)e^{-i(x+\frac{E}{\hbar}t)}$$

2、描写粒子状态的波函数在坐标表象中为 $\psi(\vec{r},t)$, 在动量表象中为 $C(\vec{p},t)$, 在力学量 $\mathbf{Q}$ 表象中为矩阵

$$A(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

且它们都是归一化的, 试指出 $|\psi(\vec{r},t)|^2$, $|C(\vec{p},t)|^2$ 与 $|a_n(t)|^2$ 的物理意义, 并分别写出用这三个波函数计算力学量 $F(\vec{r},\vec{p})$ 平均值的表示式。

3、已知 $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar\vec{L}$, 试问 $\vec{L}_x$ 、 $\vec{L}_y$ 和 $\vec{L}_z$ 是否一定不能同时测定? 说明其原由或举例说明。

4、量子力学的波函数与经典的波场有何本质性的区别?

二、在动量表象中, 求线性谐振子的能量本征函数 (15 分)

三、(16 分) 在 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{L}^2$ 的共同本征态中, 求 L_x 和 L_y 的平均值。

四.(25分) 设一体系未受微扰作用时只有两个非简并能级 $E_1^{(0)}$ 和 $E_2^{(0)}$, 现在受到微扰 $\hat{H}'$ 的作用, 体系的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b & a \\ a & E_2^{(0)} + b \end{pmatrix}, \quad a, b \text{ 为常数, 用微扰公式求能量至二级近似}$$

和波函数一级近似, 然后再用直接的方法求能量算符的本征值, 并将能量本征值与微扰法得到的能量二级近似值进行比较。

五、(14分) 一体系由三个全同玻色子组成, 玻色子之间无相互作用。玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个? 它们的波函数怎样用单粒子态构成?

量子力学自测题 (10)

1、一质量为 m 的粒子沿 x 正方向以能量 E 向 $x=0$ 处势垒运动。当 $x \leq 0$ 时，势能为零；当 $x > 0$ 时，势能为 $V_0 = \frac{3}{4}E$ 。问在 $x=0$ 处粒子被反射的几率多大？

2、计算

(1) $[\bar{L}, r^2] = ?$

(2) 设 $F(x, p)$ 是 x, p 的整函数，则 $[p, F] = ?$

3、试在氢原子的能量本征态 ψ_{nlm} 下，计算 r^{-1} 和 r^{-2} 的平均值。

4、有一个二能级体系，哈密顿量为 $H = H_0 + H'$ ， H_0 和微扰算符 H' 的矩阵表示为

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad H' = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

其中 λ 表征微扰强度， $E_1 \leq E_2$ 。用微扰法求 H 的本征值和本征态。

5、自旋投影算符 $S_n = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ ， $\vec{\sigma}$ 为泡利矩阵， $\vec{n}$ 为单位矢量 $(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ 。

(1) 对电子自旋向上态 χ_+ ($s_z = \hbar/2$)，求 S_n 的可能值及相应几率；

(2) 对 σ_n 的本征值为 1 的本征态，求 σ_y 的可能值及相应几率。

6、设质量为 m 的两个全同粒子作一维运动，它们之间的相互作用能为 $\frac{1}{2}a(x_1 - x_2)^2$ ($a > 0$)。

(1) 若粒子自旋为 0，写出它们的相对运动态的能量和波函数；

(2) 若粒子自旋 $s = 1/2$ ，写出它们的相对运动基态及第一激发态的能量和波函数。

量子力学自测题(11)

一、(30 分) 回答下列问题:

- (1) 何谓微观粒子的波粒两象性?
- (2) 波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 是用来描述什么的? 它应该满足什么样的自然条件? $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 的物理意义是什么?
- (3) 分别说明什么样的状态是束缚态、简并态与负宇称态?
- (4) 物理上可观测量应该对应什么样的算符? 为什么?
- (5) 坐标 x 分量算符与动量 x 分量算符 $\hat{p}_x$ 是对易关系是什么? 并写出两者满足的不确定关系。
- (6) 厄米算符 $\hat{F}$ 的本值 f_n 与本征矢 $|n\rangle$ 分别具有什么性质?

二 (20 分) 设氢原子处于

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) - \frac{1}{2} R_{31}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{1-1}(\theta, \varphi)$$

的状态上, 求能其量、角动量平方及角动量 Z 分量的可能取值与相应的取值概率, 进而求出它们的平均值。

三、(25 分) 设厄米算符 $\hat{H}$ 的本征矢为 $|n\rangle$, $\{|n\rangle\}$ 构成正交归一完备函数系, 定义一个算符 $\hat{U}(m, n) = |m\rangle\langle n|$

- (1) 计算对易 $[\hat{H}, \hat{U}(m, n)]$
- (2) 证明 $\hat{U}(m, n) \hat{U}^\dagger(p, q) = \delta_{nq} \hat{U}(m, p)$
- (3) 计算阵迹 $\text{Tr} \hat{F} = \sum_k \langle k | \hat{F} | k \rangle$

(4) 若算符 $\hat{A}$ 的矩阵元为 $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$, 证明

$$\hat{A} = \sum_{m,n} A_{mn} \hat{U}(m,n); \quad A_{pq} = T_r \{ \hat{A} \hat{U}^+(p,q) \}.$$

四、(25 分) 自旋为 $\frac{\hbar}{2}$, 固有磁矩为 $\bar{u} = \gamma \bar{s}$ (其中 γ 为实常数) 的粒子, 处于均匀外磁场 $\hat{B} = B_0 \hat{k}$ 中, 设 $t=0$ 时粒子处于 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 的状态。

(1) 求出 $t>0$ 时的波函数;

(2) 求出 $t>0$ 时 $\hat{s}_x$ 与 $\hat{s}_z$ 的可测值及相应的取值概率。

五、(25 分) 已知二维谐振子的哈密顿算符为 $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 (x^2 + y^2)$,

对其施加微扰 $\hat{W} = -\lambda xy$ 后, 利用微扰论求 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ 基态能量至二级修正、第二激发态能量至一级修正。

六、(25 分) 设粒子处于 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 态, 求该态中 L_x , L_y , L_z 的平均值。

量子力学自测题(12)

一、填空题 (本题 20 分)

1. 在量子力学中,体系的量子态用 Hilbert 空间中的_____来描述,而力学量用_____描述。力学量算符必为_____算符,以保证其_____为实数。对体系进行某一力学量的测量时,测量结果一般来说是不确定的。测量结果的不确定性来源于_____。
2. 在量子力学中,一个力学量是否是守恒量只决定于_____的性质,也就是说,决定于该力学量是否与体系的_____对易,而与体系的_____无关。一个力学量是否具有确定环境保保护值,只决定于体系的_____,也就是说,决定于体系是否处于该力学量的_____,无论该力学量是否守恒量。

二、(本题 15 分)

1. 设全同二粒的体系的 Hamilton 量为 $\hat{H}(1, 2,)$, 波函数为 $\psi(1, 2,)$, 试证明交换算符 $\hat{P}_{12}$ 是一个守恒量。
2. 设 $\hat{U}$ 是一个么正算符, 求证 $\hat{H} = i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} \cdot \hat{U}^+$ 是厄米算符。
3. 设 σ_y 为 Pauli 矩阵,
- (1) 求证: $e^{i\theta\sigma_y} = \cos\theta + i\sigma_y \sin\theta$
- (2) 试求: $\text{Tr} e^{i\theta\sigma_y}$

三、(本题 10 分)

求证: $\psi(xyz) = x + y + z$ 是角动量平方算符 $\hat{l}^2$ 的本征值为 $2\hbar^2$ 的本征函数。

四、(本题 15 分)

设一量子体系处于用波函数 $\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}(e^{i\varphi} \sin \theta + \cos \theta)$ 所描述的量子态。

求：(1) 在该态下， $\hat{l}_z$ 的可能测值和各个值出现的几率。

(2) $\hat{l}_z$ 的平均值。

$$\text{如有必要可利用, } Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}.$$

五、(本题 20 分)

已知，在一维无限深方势阱中运动粒子的能量本征值和本征函数分别为

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (n=1, 2, 3\cdots)$$

$$\text{设粒子受到微扰: } \hat{H}'(x) = \begin{cases} \frac{2k}{a}x, & 0 < x < \frac{a}{2} \\ \frac{2k}{a}(\alpha - x), & \frac{a}{2} < x < a \end{cases}$$

求其态 ($n=1$) 能量的一级近似值。

如有必要，可利用积分公式 $\int y \cos y dy = \cos y + y \sin y$ 。

六、(本题 20 分)

设 $|n\rangle (n=1,2,3,\dots)$ 表示一维谐振子的能量本征态，且已知

$$x|n\rangle = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} |n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} |n-1\rangle \right], \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

(1) 求矩阵元 $\langle m | x^2 | n \rangle$ 。

(2) 设该谐振子在 $t=0$ 时处于基态 $|0\rangle$ ，从 $t>0$ 开始受微扰 $H' = x^2 e^{-2kt}$ 的作用。求：经充分长时时 ($t \rightarrow \infty$) 以后体系跃迁到 $|2\rangle$ 态的几率。

量子力学考自测题 (13)

一、(20 分) 质量为 m 的粒子做一维自由运动, 如果粒子处于 $\psi(x) = A\sin^2(kx)$ 的状态上, 求其动量 p 与动能 T 的取值概率分布及平均值。

二、(20 分) 质量为 m 的粒子处于如下一维势阱中

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 \leq x \leq a) \\ V_0 (> 0) & (x > a) \end{cases}$$

若已知粒子在此势阱中存在一个能量 $E = \frac{V_0}{2}$ 的本征态, 试确定此势阱的宽度 a 。

三、(20 分) 在三维希尔伯特空间中, 已知两个算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{B}$ 的矩阵形式为

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{B} = b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

其中 b 、 ω 为实常数。证明算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{B}$ 是厄米算符, 并且两者相互对易, 进而求出它们的共同本征函数。

四、(20 分) 固有磁矩为 $\bar{M}$ 的电子, $t=0$ 时处于 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 的状态, 同时进入均匀磁场 $\vec{B} = B_0 \vec{k}$ 中。给出 $t>0$ 时的波函数, 在此状态下测量 s_z 得 $-\frac{\hbar}{2}$ 的概率是多少。

五、(20 分) 一个电荷为 q 、质量为 μ 和角频率为 ω 的线谐振子, 受到恒定弱电场 ε 的作用, 即 $\hat{W} = -q\varepsilon x$, 求其能量近似到二级修正, 波函数近似到一级修正。

量子力学自测题 (14)

一、(25 分) 质量 m 的粒子, 在阱宽为 a 的非对称一维无限深方势阱

中运动, 当 $t=0$ 时, 粒子处于状态 $\psi(x,0) = \frac{1}{2}\varphi_1(x) - \frac{1}{4}\varphi_2(x) + \frac{1}{4}\varphi_3(x)$,

其中, $\varphi_n(x)$ 为粒子的第 n 个能量本征态。

(1) 求 $t=0$ 时能量的取值概率;

(2) 求 $t>0$ 时的波函数 $\psi(x,t)$;

(3) 求 $t>0$ 时能量的取值概率。

二、(20 分) 设体系的哈密算符改写为 $\hat{H} = \frac{1}{2I_1}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \frac{1}{2}\hat{L}_z^2) + \frac{1}{2I_2}\hat{L}_z^2$,

利用适当的变换求出体系的能量本征值与相应的本征矢。

三、(25 分) 自旋为 $\frac{\hbar}{2}$, 固有磁矩为 $\bar{\mu} = \gamma\bar{s}$ (γ 为实常数) 的粒子, 处于均匀外磁场 $\vec{B} = B_0\vec{j}$ 中。设 $t=0$ 时粒子处于 $s_z = \frac{\hbar}{2}$ 的状态, 求出 $t>0$ 时的波函数, 进而计算 $\hat{s}_x$ 与 $\hat{s}_z$ 的平均值。

四、(25 分) 各向同性三维谐振子的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$$

加上微扰 $\hat{W} = -\lambda(xy + yz + zx)$ 之后, 求第一激发态的一级能量修正。

量子力学自测题 (15)

一、(20 分) 氢原子在 $t=0$ 时刻处于状态

$$\psi(\hat{r},0) = C \left[\sqrt{\frac{1}{2}} \varphi_1(\hat{r}) + \sqrt{\frac{1}{3}} \varphi_2(\hat{r}) + \sqrt{\frac{1}{2}} \varphi_3(\hat{r}) \right]$$

式中 $\psi_n(\hat{r})$ 为氢原子的第 n 个能量本征态。

(1) 计算归一化常数 $C=?$

(2) 计算 $t=0$ 时能量的取值概率与平均值;

(3) 写出任意时刻 t 的波函数 $\psi(\vec{r},t)$ 。

$$\sqrt{\frac{3}{8}} \varphi_3(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_3 t\right)$$

二、(20 分) 证明:

(1) 若一个算符与角动量算符 $\hat{J}$ 的两个分量对易, 则其必与 $\hat{J}$ 的另一个分量对易;

(2) 在 $\hat{J}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的共同本征态 $|JM\rangle$ 下, $\hat{J}_x$ 与 $\hat{J}_y$ 的平均值为零, 且当 $M=J$ 时, 测量 $\hat{J}_x$ 与 $\hat{J}_y$ 的不确定性之积为最小。

三、(20) 一个质量为 μ 的粒子, 在如下的三维势场中运动

$$V(x,y,z) = \begin{cases} V_x = \begin{cases} 0 & \left(-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}\right) \\ \infty & \left(x < -\frac{a}{2}\right), \left(x > \frac{a}{2}\right) \end{cases} \\ V_y = \frac{1}{2} \mu \omega^2 y^2 \\ V_z = \begin{cases} 0 & \left(-\frac{b}{2} \leq z \leq \frac{b}{2}\right) \\ \infty & \left(z < -\frac{b}{2}\right), \left(z > \frac{b}{2}\right) \end{cases} \end{cases}$$

求粒子的能量和相应的本征函数。

四、(20 分) 由两个自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的非全同粒子构成的体系，若两个粒子的自旋分别处于

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) \end{pmatrix}$$

的态上，求体系分别处于单态与三重态的概率。

五、(20) 分一个质量为 μ ，角频率为 ω_0 的线谐振子，受到微扰 $\hat{W} = \beta x^2$ 的作用。

- (1) 用微扰论求能量的一级修正；
- (2) 求能量的严格解，并与 (1) 的结果比较。

量子力学自测题 (16)

一、(20 分) 线谐振子在 $t=0$ 时处于 $\psi(x,0) = \frac{1}{2}\varphi_0(x) + \frac{\sqrt{3}}{2}\varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_2(x)$,

态上, 其中 $\varphi_n(x)$ 为线谐振子第 n 个能量本征值 E_n 对应的本征函数。

(1) 求在 $\psi(x,0)$ 态上能量的可测值、取值概率与平均值;

(2) 写出 $t>0$ 时刻的波函数及相应的能量取值概率与平均值。

二、(20 分) 设 $|n\rangle$ 是算符 $\hat{N} - \hat{a}_+ \hat{a}_-$ 的本征函数, 相应之本征值为 $n(\geq 0)$,

算符 $\hat{a}_+$ 和 $\hat{a}_-$ 满足对易关系 $\hat{a}_- \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \hat{a}_- = 1$ 。证明: $\hat{a}_-|n\rangle$ 和 $\hat{a}_+|n\rangle$ (其是 $n \geq 1$)

也是 $\hat{N}$ 的本征函数, 其相应的本征值分别为 $(n-1)$ 和 $(n+1)$ 。

三、(20) 设做一维自由运动的粒子 $t=0$ 时处于

$$\psi(x,0) = A[\sin^2(kx) + \cos(kx)]$$

态上, 求 $t>0$ 和 $t>0$ 时粒子动量与动能的平均值。

四、(20 分) 两个自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的非全同粒子, 自旋之间的相互作用是

$C\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2$, 其中 C 是实常数, $\hat{s}_1$ 与 $\hat{s}_2$ 分别是粒子 1 和粒子 2 的自旋算符。

设 $t=0$ 时, 粒子 1 的自旋沿 z 轴的正方向, 粒子 2 的自旋沿 z 轴的负

方向, 求 $t>0$ 时测量粒子 2 的自旋处于 z 轴负方向的概率。

五、(20 分) 三维各向同性谐振子的哈密顿算符为

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$$

试写出能量本征值与本征函数。如这谐振子又受到微扰

$\hat{W} = \frac{\lambda}{2}m\omega^2 xy (\lambda \ll 1)$ 的作用, 求基态能量到二阶修正, 并与精确解比较。

量子力学自测题 (17)

一、简答与证明：(共 25 分)

- 1、什么是德布罗意波？并写出德布罗意波的表达式。(4 分)
- 2、什么样的状态是定态，其性质是什么？(6 分)
- 3、全同费米子的波函数有什么特点？并写出两个费米子组成的全同粒子体系的波函数。(4 分)
- 4、证明 $i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2)$ 是厄密算符 (5 分)
- 5、简述测不准关系的主要内容，并写出坐标 x 和动量 $\hat{p}_x$ 之间的测不准关系。(6 分)

二、(15 分) 已知厄密算符 $\hat{A}, \hat{B}$ ，满足 $\hat{A}^2 = \hat{B}^2 = 1$ ，且 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ ，求

- 1、在 A 表象中算符 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ 的矩阵表示；
- 2、在 B 表象中算符 $\hat{A}$ 的本征值和本征函数；
- 3、从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵 S。

三、(15 分) 设氢原子在 $t=0$ 时处于状态

$$\psi(r,0) = \frac{1}{2} R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}} R_{31}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{1-1}(\theta, \varphi), \text{ 求}$$

- 1、 $t=0$ 时氢原子的 E 、 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的取值几率和平均值；
- 2、 $t>0$ 时体系的波函数，并给出此时体系的 E 、 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的取值几率和平均值。

四、(15 分) 考虑一个三维状态空间的问题，在取定的一组正交基下

$$\text{哈密顿算符由下面的矩阵给出 } \hat{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & C & 0 \\ C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix},$$

这里， $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'$ ， C 是一个常数， $C \ll 1$ ，用微扰公式求能量至二级修正值，并与精确解相比较。

- ### 五、(10 分) 令 $S_+ = S_x + iS_y$ ， $S_- = S_x - iS_y$ ，分别求 S_+ 和 S_- 作用于 S_z 的本征态 $\left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 的结果，并根据所得的结果说明 S_+ 和 S_- 的重要性是什么？

量子力学自测题 (18)

一. (10 分) 若 $\hat{S}$ 是电子的自旋算符, 求

a. $\hat{S}_x \hat{S}_z \hat{S}_x \hat{S}_y \hat{S}_x = ?$

b. $\hat{S} \times \hat{S} = ?$

二. (12 分) 若有已归一化的三个态 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ 和 $|\gamma\rangle$, 且有

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle = 0.3$$

$$\langle \alpha | \gamma \rangle = \langle \gamma | \alpha \rangle = 0.2, \quad ,$$

$$\langle \beta | \gamma \rangle = \langle \gamma | \beta \rangle = 0.8$$

试用 Schmidt 方法构成正交, 归一的新的态矢量 $|\alpha'\rangle, |\beta'\rangle$ 和 $|\gamma'\rangle$.

三. (16 分) 算符 $\hat{S}_n = e^{-i\hat{S}_z\varphi/\hbar} e^{-i\hat{S}_y\theta/\hbar} \hat{S}_z e^{i\hat{S}_y\theta/\hbar} e^{i\hat{S}_z\varphi/\hbar}$ 是电子自旋算符 $\hat{S}_z$ 经么正变换而得。试求出它的本征值和相应的本征矢在 $\hat{S}_z$ 表象中的表示。

四. (18 分) 在 $t=0$ 时, 自由粒子波函数为

$$\psi_{(x,0)} = \begin{cases} \sqrt{b/2\pi} \sin bx & |x| < \frac{2\pi}{b} \\ 0 & |x| \geq \frac{2\pi}{b} \end{cases}$$

a. 给出在该态中粒子动量的可能测得值及相应的几率振幅;

b. 求出几率最大的动量值;

c. 求出发现粒子在 $\hbar b - \hbar b + dp_x$ 区间中的几率;

d. $\psi(x,t)=?$ (积分形式即可)。

五. (18 分) 三个自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的全同粒子, 在一维位势

$$V(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$$

中运动,

a. 给出这三个粒子体系的基态和第一激发态的能量及相应的本征矢; (谐振子波函数以 $u_n(x)$ 表示);

b. 它们的简并度分别是多少?

六. (16 分) 质量为 m 的粒子处于位势

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & 0 < x \leq a, 0 < y \leq a \text{ 和 } 0 < z \leq a \\ \infty & \text{其他} \end{cases}$$

中。假设它又经受微扰 $\hat{H}' = bxy$, 试求第一激发态能量的一级修正。

量子力学自测题 (19)

I. (35 分) 回答下列问题:

- A. 写出电子在外电磁场 $(\varphi, \underline{A})$ 中的哈密顿量;
- B. 反常塞曼效应的特点, 引起的原因;
- C. 分别写出非简并态的一级、二级能量修正表达式;
- D. 若 $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$, 求 $\sigma_{\pm}^2$;
- E. 体系处于 $\psi(x, t)$ 态,
 - a. 几率密度 $\rho(x, t) = ?$;
 - b. 几率流密度 $j(x, t) = ?$;
 - c. 证明: $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$ 。
- F. 处于位势 $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 中的两个无相互作用的粒子, 试分别给出它们的基态、第一激发态和第二激发态的能量和简并度,
 - a) 非全同粒子;
 - b) 自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子;
 - c) 自旋为 0 的全同粒子。

II. (14 分) 用试探波函数 $\psi(x) = e^{-|x|/a}$, 估计一维谐振子基态能量和波函数。

III. (16 分) 设粒子在一维空间中运动, 其哈密顿量为 $\hat{H}$, 它在 $\hat{H}_0$ 表象中的表示为

$$(\hat{H}) = \begin{pmatrix} E_0 & \Delta E \\ \Delta E & E_0 \end{pmatrix},$$

A. 求 $\hat{H}$ 的本征值和本征态；

B. 若 $t=0$ 时，粒子处于 ϕ_1 ，它在 $\hat{H}_0$ 表象中的表示为 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 。试求出

$t > 0$ 时的粒子波函数；

C. 绘出粒子在 ϕ_1 态的几率随 t 的变化（以 $\hbar/\Delta E$ 为单位）。

IV. (15 分) $t=0$ 时，氢原子处于基态 $\Psi_{100} = R_{10}(r)/\sqrt{4\pi}$ ，后置于电场 $\underline{E} = (E_0 e^{-t/\tau}, 0, 0)$ 中。求 $t \rightarrow \infty$ 时，发现氢原子处于激发态 $\Psi_{211} = R_{21}(r)Y_{11}(\theta, \varphi)$ 的跃迁几率（一级近似下）（径向矩阵元不必具体计算出来；不计及电子的自旋）。

(提示: $\underline{r} = (r\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1-1} - Y_{11}), ir\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1-1} + Y_{11}), r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10})$)。

V. (10 分) 两个电子处于自旋单态， $\underline{\sigma}_1$ 和 $\underline{\sigma}_2$ 分别表示两个电子的 Pauli 算符。设 $\underline{a}$ 和 $\underline{b}$ 为空间任意给定的两个方向的单位矢量，求关联系数 $C(\underline{a}, \underline{b})$ ，即 $(\underline{a} \cdot \underline{\sigma}_1)(\underline{b} \cdot \underline{\sigma}_2)$ 的平均值。

量子力学自测题 (20)

一. 回答下列问题 (共 30 分, 第 1、2 小题各 10 分, 第 3、4 小题各 5 分)

1、下列波函数所描写的状态是否为定态? 并说明其理由。

$$(1) \psi_1(x, t) = \varphi(x) e^{i\frac{E}{\hbar}t} + \varphi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$(2) \psi_2(x, t) = u(x) e^{i(x - \frac{E}{\hbar}t)} + v(x) e^{-i(x + \frac{E}{\hbar}t)}$$

2、描写粒子状态的波函数在坐标表象中为 $\psi(\vec{r}, t)$, 在动量表象中为

$$C(\vec{p}, t), \text{ 在力学量 } Q \text{ 表象中为矩阵 } A(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}, \text{ 它们都是归一}$$

化的, 试指出 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$, $|C(\vec{p}, t)|^2$ 与 $|a_n(t)|^2$ 的物理意义, 并分别写出用这三个波函数计算力学量 $F(\vec{r}, \vec{p})$ 平均值的表示式。

3、已知 $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$, 试问 $\vec{L}_x$, $\vec{L}_y$ 和 $\vec{L}_z$ 是否一定不能同时测定? 说明其原由或举例说明。

4、量子力学的波函数与经典的波场有何本质性的区别?

二、在动量表象中, 求线性谐振子的能量本征函数 (15 分)

三、(16 分) 在 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{L}^2$ 的共同本征态中, 求 L_x 和 L_y 的平均值。

四. (25 分) 设一体系未受微扰作用时只有两个非简并能级 $E_1^{(0)}$ 和 $E_2^{(0)}$,

现在受到微扰 $\hat{H}'$ 的作用, 体系的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b & a \\ a & E_2^{(0)} + b \end{pmatrix}, \text{ 中 } a, b \text{ 为常数, 用微扰公式求能量至二}$$

级近似和波函数一级近似, 然后再用直接的方法求能量算符的本

征值, 并将能量本征值与微扰法得到的能量二级近似值进行比较。

五. (14 分) 一体系由三个全同玻色子组成, 玻色子之间无相互作用。

玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个? 它

们的波函数怎样用单粒子态构成?

量子力学自测题 (21)

1、已知一维运动的粒子在态 $\psi(x)$ 中坐标 x 和动量 p_x 的平均值分别为 x_0 和 p_0 ，求在态 $\varphi(x) = e^{-ip_0x/\hbar}\psi(x+x_0)$ 中坐标 x 和动量 p_x 的平均值。

2、一体系服从薛定谔方程 $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}k|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

(1) 指出体系的所有守恒量 (不必证明);

(2) 求基态能量和基态波函数。

3、设 $t=0$ 时氢原子处在态 $\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{10}}[2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}]$

(1) 求体系能量的平均值;

(2) 任意 t 时刻波函数 $\psi(\vec{r}, t)$;

(3) 任意 t 时刻体系处在 $l=1, m=1$ 态的几率; (4) 任意 t 时刻体系处在 $m=0$ 态的几率。

4、一维谐振子受到微扰 $H' = cx^2$ 作用，式中 c 为常数。在粒子数表中，

$$x = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a + a^+), \text{ 分别为湮灭算符和产生算符, 满足}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

(1) 用微扰论求准确到二级近似的能量值;

(2) 求能量的准确值，并与微扰论给出的结果相比较。

5、设 a, a^+ 分别为湮灭算符和产生算符，满足对易关系 $[a, a^+] = 1$ 。体系的哈密顿量为 $H = Aaa + Ba^+a^+ + Ca^+a + D$

(1) 问 A, B, C, D 满足什么条件 H 才是厄密算符?

(2) 求体系的能量。

量子力学自测题 (22)

1、扼要说明：

(a) 束缚定态的主要性质。

(b) 单价原子自发能级跃迁过程的选择定则及其理论根据。

2、设力学量算符（厄米算符） $\hat{F}$ ， $\hat{G}$ 不对易，令 $\hat{K} = i(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})$ 试证明：

(a) $\hat{K}$ 的本征值是实数。

(b) 对于 $\hat{F}$ 的任何本征态 $|\psi\rangle$ ， $\hat{K}$ 的平均值为 0。

(c) 在任何态中 $\overline{F^2 + G^2} \geq \overline{K}$

3、自旋 $\hbar/2$ 的定域电子（不考虑“轨道”运动）受到磁场作用，已知其能量算符为 $\hat{H} = \omega \hat{S}_z$ ， $\hat{H}' = \omega \hat{S}_z + v \hat{S}_x$ ($\omega, v > 0$)

(a) 求能级的精确值。

(b) 视 $v \hat{S}_x$ 项为微扰，用微扰论公式求能级。

4、质量为 m 的粒子在无限深势阱 ($0 < x < a$) 中运动，处于基态。写出能级和波函数，并计算平均值 $\overline{x}$ ， $\overline{p_x}$ ， $\overline{xp_x}$

5、某物理体系由两个粒子组成，粒子间相互作用微弱，可以忽略。

已知单粒子“轨道”态只有 3 种： $\psi_a(\vec{r})$ ， $\psi_b(\vec{r})$ ， $\psi_c(\vec{r})$ ，试分别就以下两种情况，求体系的可能（独立）状态数目。

(i) 无自旋全同粒子。

(ii) 自旋 $\hbar/2$ 的全同粒子（例如电子）。

量子力学自测题（1）参考答案

- 一、1、描写自由粒子的平面波称为德布罗意波；其表达式： $\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$
 2、定态：定态是能量取确定值的状态。性质：定态之下不显含时间的力学量的取值几率和平均值不随时间改变。
 3、全同费米子的波函数是反对称波函数。两个费米子组成的全同粒子体系的波函数为： $\phi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(q_1)\phi_2(q_2) - \phi_1(q_2)\phi_2(q_1)]$ 。

- 4、 $i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2) = i[\hat{p}_x^2, x] = i\hat{p}_x[\hat{p}_x, x] + i[\hat{p}_x, x]\hat{p}_x = 2\hbar\hat{p}_x$ ，因为 $\hat{p}_x$ 是厄密算符，所以 $i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2)$ 是厄密算符。

- 5、设 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的对易关系 $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = i\hat{k}$ ， k 是一个算符或普通的数。以 $\bar{F}$ 、 $\bar{G}$ 和 $\bar{k}$ 依次表示 $\hat{F}$ 、 $\hat{G}$ 和 k 在态 ψ 中的平均值，令 $\Delta\hat{F} = \hat{F} - \bar{F}$ ， $\Delta\hat{G} = \hat{G} - \bar{G}$ ，

则有 $\overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{\bar{k}^2}{4}$ ，这个关系式称为测不准关系。

坐标 x 和动量 $\hat{p}_x$ 之间的测不准关系为： $\Delta x \cdot \Delta \hat{p}_x \geq \frac{\hbar}{2}$

- 二、解 1、由于 $\hat{A}^2 = 1$ ，所以算符 $\hat{A}$ 的本征值是 ± 1 ，因为在 A 表象中，算符 $\hat{A}$ 的

矩阵是对角矩阵，所以，在 A 表象中算符 $\hat{A}$ 的矩阵是： $\hat{A}(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

设在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的矩阵是 $\hat{B}(A) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$ ，利用 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ 得：

$b_{11} = b_{22} = 0$ ；由于 $\hat{B}^2 = 1$ ，所以 $\begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{12}b_{21} & 0 \\ 0 & b_{21}b_{12} \end{pmatrix}$ ， $\therefore b_{12} = \frac{1}{b_{21}}$ ；

由于 $\hat{B}$ 是厄密算符， $\hat{B}^+ = \hat{B}$ ， $\therefore \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ \frac{1}{b_{12}} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{b_{12}^*} \\ b_{12}^* & 0 \end{pmatrix}$ ， $\therefore b_{12} = \frac{1}{b_{12}^*}$ 令 $b_{12} = e^{i\delta}$ ，

其中 δ 为任意实常数，得 $\hat{B}$ 在 A 表象中的矩阵表示式为： $\hat{B}(A) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}$

- 2、类似地，可求出在 B 表象中算符 $\hat{A}$ 的矩阵表示为： $\hat{A}(B) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}$

在 B 表象中算符 $\hat{A}$ 的本征方程为： $\begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ ，即 $\begin{pmatrix} e^{i\delta}\beta \\ e^{-i\delta}\alpha \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \begin{cases} -\lambda\alpha + e^{i\delta}\beta = 0 \\ e^{-i\delta}\alpha - \lambda\beta = 0 \end{cases}$ α 和 β 不同时为零的条件是上述方程的系数行列式为

$$\text{零, 即 } \begin{vmatrix} -\lambda & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0 \quad \therefore \lambda = \pm 1$$

$$\text{对 } \lambda=1 \text{ 有: } \varphi_A^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ 对 } \lambda=-1 \text{ 有: } \varphi_A^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{所以, 在 B 表象中算符 } \hat{A} \text{ 的本征值是 } \pm 1, \text{ 本征函数为 } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix} \text{ 和 } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$3、\text{类似地, 在 A 表象中算符 } \hat{B} \text{ 的本征值是 } \pm 1, \text{ 本征函数为 } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix} \text{ 和 } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵就是将算符 $\hat{B}$ 在 A 表象中的本征函数按列排成

$$\text{的矩阵, 即 } S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} & e^{-i\delta} \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{三、解: 已知氢原子的本征解为: } E_n = -\frac{e_s^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (n=1,2,3\cdots)$$

$\phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$, 将 $\psi(r, 0)$ 向氢原子的本征态展开,

$$1、\psi(r, 0) = \sum_{nlm} c_{nlm}(0)\phi_{nlm}(r, \theta, \varphi), \text{ 不为零的展开系数只有三个, 即}$$

$$c_{210}(0) = \frac{1}{2}, \quad c_{310}(0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{21-1}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ 显然, 题中所给的状态并未归一}$$

化, 容易求出归一化常数为: $\sqrt{\frac{4}{5}}$, 于是归一化的展开系数为:

$$c_{210}(0) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{4}{5}} = \sqrt{\frac{1}{5}}, \quad c_{310}(0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{4}{5}} = -\sqrt{\frac{2}{5}}, \quad c_{21-1}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{4}{5}} = \sqrt{\frac{2}{5}}$$

$$(1) \text{ 能量的取值几率 } W(E_2, 0) = \frac{1}{5} + \frac{2}{5} = \frac{3}{5}, \quad W(E_3, 0) = \frac{2}{5},$$

$$\text{平均值为: } \bar{E} = \frac{3}{5}E_2 + \frac{2}{5}E_3$$

$$(2) \hat{L}^2 \text{ 取值几率只有: } W(2\hbar^2, 0) = 1, \text{ 平均值 } \overline{\hat{L}^2} = 2\hbar^2$$

$$(3) \hat{L}_z \text{ 的取值几率为: } W(0\hbar, 0) = \frac{1}{5} + \frac{2}{5} = \frac{3}{5}, \quad W(-\hbar, 0) = \frac{2}{5}, \text{ 平均值 } \overline{\hat{L}_z} = -\frac{2}{5}\hbar$$

$$2、t > 0 \text{ 时体系的波函数为: } \psi(r, t) = \sum_{nlm} c_{nlm}(0)\phi_{nlm}(r, \theta, \varphi)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_n t)$$

$$= [c_{210}(0)\phi_{210}(r, \theta, \varphi) + c_{21-1}(0)\phi_{21-1}(r, \theta, \varphi)]\exp(-\frac{i}{\hbar}E_2 t) + c_{310}(0)\phi_{310}(r, \theta, \varphi)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_3 t)$$

$$= [\sqrt{\frac{1}{5}}\phi_{210}(r, \theta, \varphi) + \sqrt{\frac{2}{5}}\phi_{21-1}(r, \theta, \varphi)]\exp(-\frac{i}{\hbar}E_2 t) - \sqrt{\frac{2}{5}}\phi_{310}(r, \theta, \varphi)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_3 t)$$

由于 E 、 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 皆为守恒量, 所以它们的取值几率和平均值均不随时间改变,

与 $t=0$ 时的结果是一样的。

四、解：(1) $\hat{H}$ 的本征值是方程 $\det(\hat{H} - \lambda I) = 0$ 的根

$$0 = \begin{vmatrix} 1-\lambda & C & 0 \\ C & 3-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & C-2-\lambda \end{vmatrix} = (C-2-\lambda)(\lambda^2 - 4\lambda + 3 - C^2)$$

结果： $\lambda = C-2$ ， $\lambda = 2 \pm \sqrt{1+C^2}$ ，这是 $\hat{H}$ 的精确解。

(2) 根据题意，体系能级的二级修正可写为： $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$

由题设可知：能量的一级修正为： $H'_{11}=0$ ， $H'_{22}=0$ ， $H'_{33}=C$

$$E_1^{(2)} = \frac{H'_{12}H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{H'_{13}H'_{31}}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{1-3} + \frac{0}{1-(-2)} = -\frac{C^2}{2}$$

对于二级修正，有：

$$E_2^{(2)} = \frac{H'_{21}H'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H'_{23}H'_{32}}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{3-1} + \frac{0}{3-(-2)} = \frac{C^2}{2}$$

$$E_3^{(2)} = \frac{H'_{31}H'_{13}}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H'_{32}H'_{23}}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = 0 \quad \text{所以,} \quad E_1 = 1 - \frac{C^2}{2}, \quad E_2 = 3 + \frac{C^2}{2}, \quad E_3 = -2 + C$$

将 $\lambda = 2 \pm \sqrt{1+C^2}$ 展开： $\lambda = 2 \pm \sqrt{1+C^2} = 2 \pm (1 + \frac{1}{2}C^2 + \dots)$

$$\Rightarrow \lambda_1 = 3 + \frac{1}{2}C^2, \quad \lambda_2 = 1 - \frac{1}{2}C^2, \quad (C^2 \ll 1) \quad (3) \text{ 对比可知, 根据微扰}$$

公式求得的能量二级修正值，与精确求解的结果是吻合的。

$$\text{五、解：} \quad S_+ \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| +\frac{1}{2} \right\rangle + iS_y \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + i \left(\frac{i\hbar}{2} \right) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = 0,$$

$$S_+ \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + iS_y \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| +\frac{1}{2} \right\rangle + i \left(\frac{-i\hbar}{2} \right) \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| +\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$S_- \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| +\frac{1}{2} \right\rangle - iS_y \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle - i \left(\frac{i\hbar}{2} \right) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$S_- \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| -\frac{1}{2} \right\rangle - iS_y \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| +\frac{1}{2} \right\rangle - i \left(\frac{-i\hbar}{2} \right) \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

所以 S_+ 和 S_- 分别作用于 S_z 的本征态 $\left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 的结果是

$$S_+ \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = 0, \quad S_+ \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad S_- \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad S_- \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

结果表明：称 S_+ 为自旋升算符是合理的，因为它将 z 方向的自旋从 $-\hbar/2$ 增加到 $\hbar/2$ 。同样，称 S_- 为自旋降算符，因为它将 z 方向的自旋从 $\hbar/2$ 降到 $-\hbar/2$ 。 S_+ 和 S_- 容许我们从 S_z 的一个本征态跳跃到另一个本征态，它们在自旋的计算中是非常有用的。

量子力学自测题（2）参考答案

一、填空题

1. 矢量，算符，厄米，本征值，态的叠加
2. 力学量，Hamilton 量，状态，状态，本征态

二、

1. 证明 全同粒子的不可区分性体现在体系 Hamilton 量的交换对称性。也就是说，

$$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1)$$

因此，

$$\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2)\psi(1,2) = \hat{H}(2,1)\psi(2,1) = \hat{H}(1,2)\hat{P}_{12}\psi(1,2)$$

由此得到，

$$(\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2) - \hat{H}(1,2)\hat{P}_{12})\psi(1,2) = 0$$

$$[\hat{P}_{12}, \hat{H}(1,2)]\psi(1,2) = 0$$

所以

$$[\hat{P}_{12}, \hat{H}] = 0, \quad \hat{P}_{12} \text{ 为守恒量}$$

2. 证明

$$\hat{H}^+ = \left(i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} \cdot \hat{U}^+ \right)^+ = -i\hbar \left(\hat{U} \frac{d\hat{U}^+}{dt} \right) = -i\hbar \left[\frac{d}{dt}(\hat{U}\hat{U}^+) - \frac{d\hat{U}^+}{dt} \cdot \hat{U} \right]$$

因为 $\hat{H}$ 是么正的，

$$\hat{U}\hat{U}^+ = 1,$$

所以

$$\frac{d}{dt}(\hat{U}\hat{U}^+) = 0$$

因此

$$\hat{H}^+ = i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} \cdot \hat{U}^+ = \hat{H}$$

可见 $\hat{H}$ 为厄米算符。

3. 证明 (1)

$$\begin{aligned} e^{i\theta\sigma_y} &= 1 + i\theta\sigma_y - \frac{1}{2!}\theta^2\sigma_y^2 - \frac{i}{3!}\theta^3\sigma_y^3 + \dots \\ &= \left(1 - \frac{1}{2!}\theta^2 + \frac{\theta^4}{4!} - \dots \right) + i\sigma_y \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots \right) \end{aligned}$$

$$= \cos \theta + i \sigma_y \sin \theta$$

(2) 由于

$$\cos \theta + i \sigma_y \sin \theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

因此,

$$\text{Tr} e^{i\theta \sigma_y} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = 2 \cos \theta$$

三、证明 因为

$$\hat{l}_x \psi = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi = -i\hbar(y - z)$$

$$\hat{l}_y \psi = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi = -i\hbar(z - x)$$

$$\hat{l}_z \psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = -i\hbar(x - y)$$

由此得到

$$\hat{l}_x^2 \psi = \hbar^2(y + z), \quad \hat{l}_x^2 \psi = \hbar^2(z + x), \quad \hat{l}_x^2 \psi = \hbar^2(x + y)$$

因此,

$$\hat{l}^2 \psi = \hat{l}_x^2 \psi + \hat{l}_y^2 \psi + \hat{l}_z^2 \psi = 2\hbar(x + y + z) = 2\hbar^2 \psi$$

可见, $\psi = x + y + z$ 是 $\hat{l}^2$ 的本征值为 $2\hbar^2$ 的本征函数。

四、解 先把 $\psi(\theta, \varphi)$ 用球谐函数展开如下:

$$\begin{aligned} \psi(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (e^{i\varphi} \sin \theta + \cos \theta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sqrt{2} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-\sqrt{2} Y_{11} + Y_{10}) = \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} - \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} \end{aligned}$$

可见, 体系的 $l=1$, $m=0, 1$ 。因此, $\hat{l}_z$ 的可能测值为 0 或 $\hbar$, 出现 0 的几率为 $\frac{1}{3}$, 出现 $\hbar$ 的几率为 $\frac{2}{3}$ 。 $\hat{l}_z$ 的平均值为

$$\bar{l}_z = \frac{2}{3}\hbar + \frac{1}{3} \cdot 0 = \frac{2}{3}\hbar$$

五、解 受到微扰 $\hat{H}'$ 的作用后基态能量的一级修正值为

$$E^{(1)} = H'_{11} = (\psi_1, \hat{H}' \psi_1)$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^{\frac{a}{2}} \psi_1^* \hat{H}' \psi_1 dx + \int_{\frac{a}{2}}^a \psi_1^* \hat{H}' \psi_1 dx \\ &= \frac{4k}{a^2} \int_0^{\frac{a}{2}} x \sin^2 \frac{\pi}{a} x dx + \frac{4k}{a^2} \int_{\frac{a}{2}}^a (a-x) \sin^2 \frac{\pi}{a} x dx \\ &= \frac{2k}{a^2} \int_0^{\frac{a}{2}} x \left(1 - \cos \frac{2\pi}{a} x\right) dx + \frac{2k}{a^2} \int_{\frac{a}{2}}^a (a-x) \left(1 - \cos \frac{2\pi}{a} x\right) dx \\ &= \frac{2k}{a^2} \left[\frac{a^2}{8} + \frac{a^2}{\pi^2} + \frac{a^2}{8} \right] = k \left(\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2} \right) \end{aligned}$$

六、解 (1) 利用公式：

$$x|n\rangle = \frac{1}{a} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} |n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} |n-1\rangle \right]$$

得到

$$\begin{aligned} x^2|n\rangle &= \frac{1}{a} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} x|n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} x|n-1\rangle \right] \\ &= \frac{1}{a^2} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \left(\sqrt{\frac{n+2}{2}} |n+2\rangle + \sqrt{\frac{n+1}{2}} |n\rangle \right) + \\ &\quad \frac{1}{a^2} \sqrt{\frac{n}{2}} \left(\sqrt{\frac{n}{2}} |n\rangle + \sqrt{\frac{n-1}{2}} |n-2\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2a^2} \left[\sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + (2n+1) |n\rangle + \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle \right] \end{aligned}$$

因此，

$$\begin{aligned} \langle m | x^2 | n \rangle &= \frac{1}{2a^2} \left[\sqrt{(n+1)(n+2)} \langle m | n+2 \rangle + (2n+1) \langle m | n \rangle + \sqrt{n(n-1)} \langle m | n-2 \rangle \right] \\ &= \frac{1}{2a^2} \left[\sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} + (2n+1) \delta_{m,n} + \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} \right] \end{aligned}$$

由此可见

$$\langle 2|x^2|0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2a^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\omega}$$

(2) 在一级近似下, 体系从能级 E_0 跃迁到 E_n 的跃迁振幅为,

$$a_{n0}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle n|H'|0\rangle e^{i\omega_{n0}t} dt$$

其中, $\omega_{n0} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_0)$ 。因此, 从基态 $|0\rangle$ 跃迁振幅

$$\begin{aligned} a_{20}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle 2|x^2|0\rangle e^{(i\omega_{20}-2k)t} dt = \frac{\langle 2|x^2|0\rangle}{i\hbar} \int_0^t e^{(i\omega_{20}-2k)t} dt \\ &= \frac{\langle 2|x^2|0\rangle}{i\hbar} \cdot \frac{e^{(i\omega_{20}-2k)t}}{i\omega_{20}-2k} \Big|_0^t = \frac{\langle 2|x^2|0\rangle (e^{(i\omega_{20}-2k)t} - 1)}{i\hbar(i\omega_{20}-2k)} \end{aligned}$$

经充分长时间后 ($t \rightarrow \infty$),

$$a_{20}(t \rightarrow \infty) = -\frac{\langle 2|x^2|0\rangle}{i\hbar} \frac{1}{i\omega_{20}-2k}$$

因此, 跃迁几率为

$$\begin{aligned} P_{20}(\infty) &= |a_{20}(\infty)|^2 = \frac{1}{2m^2\omega^2} \cdot \frac{1}{4k^2 + \omega_{20}^2} \\ &= \frac{1}{2m^2\omega^2} \cdot \frac{\hbar^2}{4k^2\hbar^2 + (E_2 - E_0)^2} \\ &= \frac{1}{2m^2\omega^2} \cdot \frac{\hbar^2}{4\hbar^2k^2 + 4\hbar^2\omega^2} = \frac{1}{8m^2\omega^2(k^2 + \omega^2)} \end{aligned}$$

量子力学自测题 (3) 参考答案

三、简答题 (每小题 5 分, 共 40 分)

1. 一粒子的波函数为 $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$, 写出粒子位于 $x \sim x + dx$ 间的几率。

解: $dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\psi(\vec{r})|^2$ 。

2. 粒子在一维 δ 势阱 $V(x) = -\gamma\delta(x)$ ($\gamma > 0$)

中运动, 波函数为 $\psi(x)$, 写出 $\psi'(x)$ 的跃变条件。

解: $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2} \psi(0)。$

3. 量子力学中, 体系的任意态 $\psi(x)$ 可用一组力学量完全集的共同本征态

$\psi_n(x)$ 展开:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x),$$

写出展开式系数 c_n 的表达式。

解: $c_n = (\psi_n(x), \psi(x)) = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx。$

4. 给出如下对易关系:

$$[z, p_z] = ? \quad [x, p_y] = ? \quad [L_x, L_z] = ?$$

$$[s^2, s_x] = ? \quad [\sigma_z, \sigma_y] = ?$$

解: $[z, p_z] = i\hbar \quad [x, p_y] = 0 \quad [L_x, L_z] = -i\hbar L_y$

$$[s^2, s_x] = 0 \quad [\sigma_z, \sigma_y] = -2i\sigma_x$$

5. 一个电子运动的旋量波函数为 $\psi(\vec{r}, s_z) = \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}, \hbar/2) \\ \psi(\vec{r}, -\hbar/2) \end{pmatrix}$, 写出表示电子

自旋向上、位置在 $\vec{r}$ 处的几率密度表达式, 以及表示电子自旋向下的几率的表达式。

解: $|\psi(\vec{r}, \hbar/2)|^2, \quad \int |\psi(\vec{r}, -\hbar/2)|^2 d^3r$

6. 何谓几率流密度? 写出几率流密度 $\vec{j}(\vec{r}, t)$ 的表达式。

解: 单位时间内通过与粒子前进方向垂直的单位面积的几率称为几率流密度。

$$j(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

7. 散射问题中, 高能粒子散射和低能粒子散射分别宜采用什么方法处理?

解: 高能粒子散射宜采用玻恩近似方法处理; 低能粒子散射宜采用分波法处理。

8. 一维运动中, 哈密顿量 $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, 求 $[x, H] = ? \quad [p, H] = ?$

$$\text{解: } [x, H] = \frac{i\hbar p}{m}, \quad [p, H] = -i\hbar \frac{d}{dx} V(x)$$

二、计算题 (共 60 分。9—11 题各 10 分; 12、13 题各 15 分)

9. 在时间 $t=0$ 时, 一个线性谐振子处于用下列归一化的波函数所描写的状态:

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{5}} u_0(x) + \sqrt{\frac{1}{2}} u_2(x) + c_3 u_3(x),$$

式中 $u_n(x)$ 是振子的第 n 个本征函数。

(1) 试求 c_3 的数值;

(2) 写出在 t 时刻的波函数;

(3) 在 $t=0$ 时振子能量的平均值是多少? $t=1$ 秒时呢?

$$\text{解: (1) } \left(\sqrt{\frac{1}{5}} \right)^2 + \left(\sqrt{\frac{1}{2}} \right)^2 + c^2 + 1 = 1, \quad \text{得 } c = \sqrt{\frac{3}{10}}.$$

$$(2) \quad \psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{5}} u_0(x) e^{-i\frac{1}{2}\omega t} + \sqrt{\frac{1}{2}} u_2(x) e^{-i\frac{5}{2}\omega t} + \sqrt{\frac{3}{10}} u_3(x) e^{-i\frac{7}{2}\omega t}.$$

(3) 在 $t=0$ 时振子能量的平均值是

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \hbar \omega \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{5}} \right)^2 + \frac{5}{2} \hbar \omega \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{2}} \right)^2 + \frac{7}{2} \hbar \omega \cdot \left(\sqrt{\frac{3}{10}} \right)^2 = \frac{12}{5} \hbar \omega;$$

$$t=1 \quad \text{秒时振子能量的平均值也是 } \frac{12}{5} \hbar \omega.$$

10. $|n\rangle$ 为 L_z 的本征态, 本征值为 $n\hbar$ 。求在 L_z 的本征态 $|n\rangle$ 下, L_x 和 L_y 的平均值。

$$\begin{aligned} \text{解: } \bar{L}_x &= \frac{1}{i\hbar} \langle n | [L_y, L_z] | n \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle n | [L_y L_z - L_z L_y] | n \rangle = \frac{1}{i\hbar} [\langle n | L_y L_z | n \rangle - \langle n | L_z L_y | n \rangle] \\ &= \frac{n}{i} [\langle n | L_y | n \rangle - \langle n | L_y | n \rangle] = 0, \end{aligned}$$

$$\text{同理,} \quad \bar{L}_y = 0.$$

$$11. \quad \text{氢原子处于状态 } \psi(\vec{r}, s_z) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} R_{21} Y_{11} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} R_{21} Y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

(1) 求轨道角动量的 z 分量 L_z 的平均值;

(2) 求自旋角动量的 z 分量 s_z 的平均值;

(3) 求总磁矩 $\vec{M} = -\frac{e}{2\mu}\vec{L} - \frac{e}{\mu}\vec{s}$ 的 z 分量 M_z 的平均值。

解:

$$(1) \quad \bar{L}_z = \hbar \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^2 + 0 \cdot \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 = \frac{\hbar}{4};$$

$$(2) \quad \bar{s}_z = \frac{\hbar}{2} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \cdot \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 = -\frac{\hbar}{4};$$

$$(3) \quad \bar{M}_z = -\frac{e}{2\mu}\bar{L}_z - \frac{e}{\mu}\bar{s}_z = -\frac{e}{2\mu} \cdot \left(\frac{\hbar}{4}\right) - \frac{e}{\mu} \cdot \left(-\frac{\hbar}{4}\right) = \frac{e\hbar}{8\mu} = \frac{1}{4}\mu_B。$$

12. $\vec{s}$ 、 $\vec{L}$ 分别为电子的自旋和轨道角动量, $\vec{J} = \vec{s} + \vec{L}$ 为电子的总角动量。证

$$\text{明: } [\vec{J}, \vec{s} \cdot \vec{L}] = 0; [J^2, J_\alpha] = 0, \alpha = x, y, z。$$

$$\text{证: } [J_x, \vec{s} \cdot \vec{L}] = [L_x + s_x, s_x L_x + s_y L_y + s_z L_z]$$

$$= s_y [L_x, L_y] + s_z [L_x, L_z] + [s_x, s_y] L_y + [s_x, s_z] L_z$$

$$= i\hbar(s_y L_z - s_z L_y + s_z L_y - s_y L_z) = 0。$$

$$\text{同理, } [J_y, \vec{s} \cdot \vec{L}] = 0, [J_z, \vec{s} \cdot \vec{L}] = 0, \text{ 从而 } [\vec{J}, \vec{s} \cdot \vec{L}] = 0。$$

$$[J^2, J_x] = [J_x^2, J_x] + [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x]$$

$$= J_y [J_y, J_x] + [J_y, J_x] J_y + J_z [J_z, J_x] + [J_z, J_x] J_z$$

$$= i\hbar(-J_y J_z - J_z J_y + J_z J_y + J_y J_z) = 0。$$

$$\text{同理, } [J^2, J_y] = 0, [J^2, J_z] = 0, \text{ 从而 } [J^2, J_\alpha] = 0。$$

13. 质量为 μ 的粒子受微扰后, 在一维势场

$$V(x) = \begin{cases} A \cos \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & x < 0, x > a \end{cases}$$

中运动。

(1) 题中应当把什么看作微扰势?

(2) 写出未受微扰时的能级和波函数;

(3) 用微扰论计算基态能量到二级近似, 其中 $A = \frac{\pi^2 \hbar^2}{10\mu a^2}$ 。

解: (1) 应当把 $V(x)$ 看作微扰势, 即

$$H' = V(x) = \begin{cases} A \cos \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & x < 0, x > a \end{cases}。$$

(2) 未受微扰时的波函数和能级分别为

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

(3) 未受微扰时的基态波函数和能量分别为

$$\psi_1^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}, \quad E_1^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2},$$

基态能量的一级修正:

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= H'_{11} = \int_0^a \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi x}{a} \cdot A \cos \frac{\pi x}{a} dx = \frac{2A}{\pi} \int_0^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} d \sin \frac{\pi x}{a} \\ &= \frac{2A}{3\pi} \sin^3 \frac{\pi x}{a} \Big|_0^a = 0, \end{aligned}$$

基态能量的二级修正:

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= \sum_n' \frac{|H'_{n1}|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}, \\ H'_{n1} &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \cdot A \cos \frac{\pi x}{a} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} dx \\ &= \frac{A}{a} \int_0^a \sin \frac{n\pi x}{a} \cdot 2 \cos \frac{\pi x}{a} \cdot \sin \frac{\pi x}{a} dx \\ &= \frac{A}{\pi} \int_0^a \sin \frac{n\pi x}{a} \cdot \sin \frac{2\pi x}{a} d \frac{\pi x}{a} \\ &= \frac{A}{\pi} \int_0^\pi \sin ny \cdot \sin 2y dy \\ &= \frac{A}{\pi} \cdot \frac{\pi}{2} \delta_{n2} = \frac{A}{2} \delta_{n2} \end{aligned}$$

所以
$$E_1^{(2)} = \frac{(A/2)^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{A^2}{4} \cdot \frac{1}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} (1-4)} = -\frac{\mu a^2 A^2}{6\pi^2 \hbar^2}。$$

$$= -\frac{\mu a^2}{6\pi^2 \hbar^2} \cdot \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{10\mu a^2} \right)^2 = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{600\mu a^2}。$$

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{600\mu a^2} = \frac{299\pi^2 \hbar^2}{600\mu a^2}。$$

量子力学自测题（4）参考答案

一、1、厄密算符的本征值是实数，本征矢是正交、归一和完备的。

2、在无穷远处为零的状态为束缚态；简并态是指一个本征值对应一个以上本征函数的情况；将波函数中坐标变量改变符号，若得到的新函数与原来的波函数相同，则称该波函数具有偶宇称。

3、全同玻色子的波函数是对称波函数。两个玻色子组成的全同粒子体系的波函数为：

$$\phi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_2) + \varphi_1(q_2)\varphi_2(q_1)]$$

4、宇称算符 $\hat{P}$ 和坐标 x 的对易关系是： $[\hat{P}, x] = -2x\hat{P}$ ，将其代入测不准关系知，只有当 $x\hat{P} = 0$ 时的状态才可能使 $\hat{P}$ 和 x 同时具有确定值，由 $\delta(x) = \delta(-x)$ 知，波函数 $\delta(x)$ 满足上述要求，所以 $\delta(x)$ 是算符 $\hat{P}$ 和 x 的共同本征函数。

5、设 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的对易关系 $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = i\hat{k}$ ， k 是一个算符或普通的数。以 $\bar{F}$ 、 $\bar{G}$ 和 $\bar{k}$ 依次表示 $\hat{F}$ 、 $\hat{G}$ 和 k 在态 ψ 中的平均值，令 $\Delta\hat{F} = \hat{F} - \bar{F}$ ， $\Delta\hat{G} = \hat{G} - \bar{G}$ ，

$$\text{则有 } \overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{\bar{k}^2}{4}，\text{ 这个关系式称为测不准关系。}$$

时间 t 和能量 E 之间的测不准关系为： $\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

二、1、由于 $\hat{A}^2 = 1$ ，所以算符 $\hat{A}$ 的本征值是 ± 1 ，因为在 A 表象中，算符 $\hat{A}$ 的

$$\text{矩阵是对角矩阵，所以，在 } A \text{ 表象中算符 } \hat{A} \text{ 的矩阵是：} \hat{A}(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

设在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的矩阵是 $\hat{B}(A) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$ ，利用 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ 得：

$$b_{11} = b_{22} = 0；\text{ 由于 } \hat{B}^2 = 1，\text{ 所以 } \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{12}b_{21} & 0 \\ 0 & b_{21}b_{12} \end{pmatrix} = 1，$$

$$\therefore b_{12} = \frac{1}{b_{21}}；\text{ 由于 } \hat{B} \text{ 是厄密算符，} \hat{B}^+ = \hat{B}，\therefore \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ \frac{1}{b_{12}} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{b_{12}^*} \\ b_{12}^* & 0 \end{pmatrix} \therefore b_{12} = \frac{1}{b_{12}^*}$$

令 $b_{12} = e^{i\delta}$ ，（ δ 为任意实常数）得 $\hat{B}$ 在 A 表象中的矩阵表示式为：

$$\hat{B}(A) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}$$

2、在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的本征方程为：
$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\text{即 } \begin{pmatrix} e^{i\delta} \beta \\ e^{-i\delta} \alpha \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -\lambda \alpha + e^{i\delta} \beta = 0 \\ e^{-i\delta} \alpha - \lambda \beta = 0 \end{cases} \quad \alpha \text{ 和 } \beta \text{ 不同时为零的条件是上述}$$

$$\text{方程的系数行列式为零, 即 } \begin{vmatrix} -\lambda & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0 \quad \therefore \lambda = \pm 1$$

$$\text{对 } \lambda = 1 \text{ 有: } \varphi_B^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ 对 } \lambda = -1 \text{ 有: } \varphi_B^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

所以, 在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的本征值是 ± 1 , 本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix}$ 和 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$

3、从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵就是将算符 $\hat{B}$ 在 A 表象中的本征函数按列

$$\text{排成的矩阵, 即 } S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} & e^{-i\delta} \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

三、解: 1、 $t = 0$ 的情况: 已知线谐振子的能量本征解为:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(-\alpha^2 x^2) H_n(\alpha x)$$

$$\text{当 } n = 0, 1 \text{ 时有: } \varphi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp(-\alpha^2 x^2), \quad \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}} (\alpha x) \exp(-\alpha^2 x^2)$$

于是 $t = 0$ 时的波函数可写成:
$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{3}} \varphi_0(x) - \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1(x)$$
, 容易验证它是归一化的波函数, 于是 $t = 0$ 时的能量取值几率为:

$$W(E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, 0) = \frac{1}{3}, \quad W(E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega, 0) = \frac{2}{3}, \quad \text{能量取其他值的几率皆为零。}$$

$$\text{能量的平均值为: } \bar{E} = \frac{1}{3} E_0 + \frac{2}{3} E_1 = \frac{7}{6} \hbar\omega$$

$$2、t > 0 \text{ 时体系波函数 } \psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{3}} \varphi_0(x) \exp(-\frac{i}{2} \omega t) - \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1(x) \exp(-\frac{3i}{2} \omega t)$$

显然, 哈密顿量为守恒量, 它的取值几率和平均值不随时间改变, 故 $t > 0$ 时体系能量的取值几率和平均值与 $t = 0$ 的结果完全相同。

$$\text{四、解: 将矩阵改写成: } \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2\lambda & 0 \\ 2\lambda & \lambda & 3\lambda \\ 0 & 3\lambda & 2\lambda \end{pmatrix}$$

$$\text{能量的零级近似为: } E_1^{(0)} = 1, \quad E_2^{(0)} = 2, \quad E_3^{(0)} = 3$$

能量的一级修正为: $E_1^{(1)} = 0$, $E_2^{(1)} = \lambda$, $E_3^{(1)} = 2\lambda$

能量的二级修正为: $E_1^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{|H'_{13}|^2}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = -4\lambda^2$,

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{21}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|H'_{23}|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = 4\lambda^2 - 9\lambda^2 = -5\lambda^2,$$

$$E_3^{(2)} = \frac{|H'_{31}|^2}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|H'_{32}|^2}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = 9\lambda^2$$

所以体系近似到二级的能量为: $E_1 \approx 1 - 4\lambda^2$, $E_2 \approx 2 + \lambda - 5\lambda^2$, $E_3 \approx 3 + 2\lambda + 9\lambda^2$

先求出 $\hat{H}_0$ 属于本征值 1、2 和 3 的本征函数分别为: $\varphi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\varphi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$,

$$\varphi_3^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

利用波函数的一级修正公式 $\varphi_k^{(1)} = \sum_{i \neq k} \frac{H'_{ik}}{E_k^{(0)} - E_i^{(0)}} \varphi_i^{(0)}$, 可求出波函数的一级修正

$$\varphi_1^{(1)} = -2\lambda \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_2^{(1)} = \lambda \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -3 \end{pmatrix}, \quad \varphi_3^{(1)} = 3\lambda \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

为:

$$\varphi_1 \approx \begin{pmatrix} 1 \\ -2\lambda \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_2 \approx \begin{pmatrix} 2\lambda \\ 1 \\ -3\lambda \end{pmatrix}, \quad \varphi_3 \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 3\lambda \\ 1 \end{pmatrix}$$

近似到一级的波函数为:

五、解: 由玻色子组成的全同粒子体系, 体系的波函数应是对称函数。以 q_i 表示第 i ($i=1,2,3$) 个粒子的坐标, 根据题设, 体系可能的状态有以下四个:

- (1) $\varphi_s^{(1)} = \phi_1(q_1)\phi_1(q_2)\phi_1(q_3)$; (2) $\varphi_s^{(2)} = \phi_2(q_1)\phi_2(q_2)\phi_2(q_3)$
- (3) $\varphi_s^{(3)} = C[\phi_1(q_1)\phi_1(q_2)\phi_2(q_3) + \phi_1(q_1)\phi_2(q_2)\phi_1(q_3) + \phi_1(q_2)\phi_2(q_1)\phi_1(q_3)]$;
- (4) $\varphi_s^{(4)} = C[\phi_2(q_1)\phi_2(q_2)\phi_1(q_3) + \phi_2(q_1)\phi_1(q_2)\phi_2(q_3) + \phi_2(q_2)\phi_2(q_3)\phi_1(q_1)]$

量子力学自测题 (5) 参考答案

一、填空题

1. 能量的量子化, 粒子, 稳定性, 线光谱
2. 厄米, 实数, 该力学量的本征值, 该力学量的某一本征态, 态的叠加, 两个力学量算符对易

二、1. 证明 (1) 因为 $\hat{N}^+ = (\hat{a}^+ \hat{a})^+ = \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{N}$, 所以 $\hat{N}$ 是一个厄米算符, 它的本征值必为实数。

$$(2) \hat{N}^2 = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{a}^+ (1 - \hat{a}^+ \hat{a}) \hat{a} = \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{N}。$$

(3) 设 $\hat{N}$ 的本征值为 n , 本征矢量为 $|n\rangle$, 则因为

$$\hat{N}^2 |n\rangle = \hat{N} |n\rangle$$

所以

$$n^2 |n\rangle = n |n\rangle$$

从而得到 $n^2 - n = 0$, 可见, $\hat{N}$ 的本征值为 $n=0$ 或 $n=1$ 。

2. 证明 由 $\sigma \times \sigma = 2i\sigma$
得

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$

即

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z \quad (1)$$

(1) 式的两边左乘 σ_x 得,

$$\sigma_y = \sigma_x \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_x \sigma_z$$

右乘 σ_x 得,

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_x - \sigma_y = 2i\sigma_z \sigma_x$$

两式相加得

$$2i(\sigma_x \sigma_z + \sigma_z \sigma_x) = 0$$

这就是说,

$$\{\sigma_z, \sigma_x\} = 0$$

完全相同的方法可以证明,

$$\{\sigma_y, \sigma_z\} = 0, \quad \{\sigma_x, \sigma_y\} = 0$$

三、1. 解 (1) 四个可能的自旋态有,

$$\chi_1 = |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$\chi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\chi_3 = |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$\chi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

(2) 因为空间波函数对 $\hat{r}_1, \hat{r}_2$ 的交换对称, 对两个电子的交换反对称的总体波函数为:

$$\varphi = \psi_{100}(\hat{r}_1)\psi_{100}(\hat{r}_2)\chi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{100}(\hat{r}_1)\psi_{100}(\hat{r}_2)(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

2. 解 (1) 在自旋态 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle)$ 下, $\hat{S}_z$ 的可能测值为 $\frac{\hbar}{2}$ 或 $-\frac{\hbar}{2}$,

相应的几率分别为 $\frac{1}{2}$ 。

(2) 把自旋态 $|\psi\rangle$ 写成

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |\uparrow_x\rangle$$

可见, 自旋态 $|\psi\rangle$ 正是 $\hat{S}_z$ 的本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的本征态 $|\uparrow_x\rangle$, 因此 $\hat{S}_z$ 的测值为 $\frac{\hbar}{2}$, 几率为 1。

四、解 类氢离子的 Hamilton 量为

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

当 $Z \rightarrow Z+1$ 时, 体系的 Hamilton 量变为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{(Z+1)e^2}{r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} - \frac{e^2}{r} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

其中

$$\hat{H}' = -\frac{e^2}{r}$$

因此, 能量的一级修正值

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \hat{H}'_{11} = (\psi_{100}, \hat{H}'\psi_{100}) \\ &= -\frac{e^2}{\pi} \frac{Z^3}{a^3} \iiint \frac{1}{r} e^{-\frac{2Zr}{a}} d^3\hat{r} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{e^2 Z^3}{\pi a^3} \iiint \frac{1}{r} e^{-\frac{2Zr}{a}} r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \\
&= -\frac{e^2 Z^3}{\pi a^3} 4\pi \int_0^\infty r e^{-\frac{2Zr}{a}} dr = -\frac{Ze^2}{a}
\end{aligned}$$

在计算中利用了积分公式

$$\int_0^\infty x e^{-2ax} dx = \frac{1}{4a^2}$$

因此，基态能量的一级近似值是

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = -\left(\frac{Z^2 e^2}{2a} + \frac{Ze^2}{a}\right) = -\frac{Ze^2}{a} \left(\frac{Z}{a} + 1\right)$$

五、解 (1) 利用

$$\frac{d}{dx} \psi_n(x) = a \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

$$\bar{p} = (\psi_n, \hat{p} \psi_n) = -i\hbar \left(\psi_n, \frac{d}{dx} \psi_n \right)$$

$$= -i\hbar a \sqrt{\frac{n}{2}} (\psi_n, \psi_{n-1}) + i\hbar a \sqrt{\frac{n+1}{2}} (\psi_n, \psi_{n+1}) = 0$$

(2) 谐振子的动能 $T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ 的平均值

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_n, \frac{d^2}{dx^2} \psi_n)$$

利用

$$\frac{d}{dx} \psi_n(x) = a \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

可以得到

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dx^2} \psi_n &= \frac{d}{dx} \left[a \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1} \right) \right] \\
&= a \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \frac{d}{dx} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \frac{d}{dx} \psi_{n+1} \right] \\
&= \frac{a^2}{2} \left[\sqrt{n(n+1)} \psi_{n-2} - (2n+1) \psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2} \right]
\end{aligned}$$

因此，

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi_n, \frac{a^2}{2} (2n+1) \psi_n \right) = \frac{\hbar^2 a^2}{4m} (2n+1) = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \frac{1}{2} E_n$$

六、解 先把 Hamilton 量分解成 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, 其中

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}' = \begin{pmatrix} 0 & a_1 & a_2 \\ a_1^* & 0 & a_3 \\ a_2^* & a_3^* & E_3 \end{pmatrix}$$

很容易看出, 能量的一级修正值

$$E_1^{(1)} = H'_{11} = 0, \quad E_2^{(1)} = H'_{22} = 0, \quad E_3^{(1)} = H'_{33} = 0$$

二级修正值

$$E_1^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_1 - E_2} + \frac{|H'_{13}|^2}{E_1 - E_3} = \frac{|a_1|^2}{E_1 - E_2} + \frac{|a_2|^2}{E_1 - E_3}$$

$$E_2^{(2)} = \frac{|a_1|^2}{E_1 - E_2} + \frac{|a_3|^2}{E_2 - E_3}, \quad E_3^{(2)} = \frac{|a_2|^2}{E_3 - E_1} + \frac{|a_3|^2}{E_3 - E_2}$$

量子力学自测题 (6) 参考答案

一、填空题

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, \text{ 守恒}, \frac{\hbar^2}{2m}, e^{ikx}, e^{-ikx}, \text{ 能量, 动量, } \hbar k, -\hbar k$$

二、解 (1) 由于 $\psi(x)$ 是实函数, $\psi^*(x) = \psi(x)$, 因此, 动量平均值

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx$$

进行分部积分得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx = \psi^2(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \psi(x) \cdot \psi(x) dx$$

$$= - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx$$

这就是说,

$$\bar{p} = -\bar{p}$$

由此得到动量平均值

$$\overline{p} = 0$$

(2) 由于 $\psi(x)$ 是实函数, 动量的平均值

$$\begin{aligned}\overline{p} &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \hat{p} \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ik_0 x} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) e^{ik_0 x} dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ik_0 x} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} + ik_0 \psi(x) \right) e^{ik_0 x} dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx + \hbar k_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x) dx\end{aligned}$$

但前面已经证明, 当 $\psi(x)$ 是实函数时, 上式的第一项等于零。在上式的第二项中, 由于 $\psi(x)$ 是归一化的,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x) dx = 1$$

因此最后得动量平均值

$$\overline{p} = \hbar k_0$$

三、解 空穴中电子的能量

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3 \dots$$

基态和第一激发态的能量分别为

$$E_{111} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad E_{211} = E_{121} = E_{112} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$

因此, 电子从基态跃迁到第一激发态时所吸收电磁波的频率满足

$$\Delta E = E_{211} - E_{111} = \hbar \nu$$

电磁波的波长

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{2ma^2 \hbar c}{3\hbar^2 \pi^2} = \frac{4ma^2 c}{3\hbar \pi}$$

四、解 电子的自旋初态为 $|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, 自旋方向在 $x-z$ 平面内 ($\varphi = 0$)

与 z 轴成 θ 角的态为

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

因此, 在 $t>0$ 时, 电子的自旋方向在 $x-z$ 平面内与 z 轴成 θ 角的几率为

$$P(\theta) = |\langle \psi | \psi_0 \rangle|^2 = \left| \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

五、解 选取 $\{\hat{H}, \hat{J}, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2\}$ 为力学量完全集, 设其共同本征矢量为 $|j, m, l, s\rangle$, 其中

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

j, m 分别为 $\hat{J}$ 和 $\hat{J}_z$ 的相应量子数。 $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$ 的本征值方程分别为

$$\hat{J}^2 |j, m, l, s\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m, l, s\rangle$$

$$\hat{L}^2 |j, m, l, s\rangle = l(l+1)\hbar^2 |j, m, l, s\rangle$$

$$\hat{S}^2 |j, m, l, s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |j, m, l, s\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m, l, s\rangle = m\hbar |j, m, l, s\rangle$$

由于

$$\hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S})^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}$$

相互作用 Hamilton 量及其本征值方程可以写成

$$\hat{H} = A\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2}A(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

$$\hat{H} |jmls\rangle = \frac{1}{2}A(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) |jmls\rangle = E |jmls\rangle$$

同时, 由于 $l=2, s=1$, 体系的总角动量量子数

$$j = l+s, l+s-1, \dots, |l-s| = 3, 2, 1$$

因此, 体系的能量为

$j=3$ 时,

$$E_3 = \frac{A}{2}\hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

$$= \frac{A}{2} \hbar^2 [3(3+1) - 2(2+1) - 1(1+1)] = 2A\hbar^2$$

j=2 时,

$$E_2 = \frac{A}{2} \hbar^2 [2(2+1) - 2(2+1) - 1(1+1)] = -A\hbar^2$$

j=1 时,

$$E_1 = \frac{A}{2} \hbar^2 [1(1+1) - 2(2+1) - 1(1+1)] = -3A\hbar^2$$

简并度: j=3 时, f=2j+1=7, j=2 时, f=5, j=1 时, f=3。

六、解 (1) 把波函数 $\psi(x)$ 用能量本征函数 $\psi_n(x)$ 展开:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_n c_n \cos \frac{n\pi x}{a}$$

因此

$$\begin{aligned} c_n = (\psi_n, \psi) &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \int_{-a/2}^{a/2} [(a/2)^2 - x^2] \cos \frac{n\pi x}{a} dx \\ &= (-1)^{(n-1)/2} \frac{8\sqrt{15}}{n^3 \pi^3}, \quad n=1, 3, 5\cdots \end{aligned}$$

由此得到粒子处于各个能级的几率

$$|c_n|^2 = \frac{960}{\pi^6 n^6}, \quad n=1, 3, 5\cdots$$

(2) 利用以上结果, 能量平均值

$$\bar{E} = \sum_n |c_n|^2 E_n = \frac{960}{\pi^6} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(\frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \cdots \right) = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

七、解 (1) 以质点运动的平衡位置作为势能零点, 则在小角近似下质点的势能

$$V = mg(l - l \cos \theta) = mgl - mgl \left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \cdots \right) \approx \frac{1}{2} mgl \theta^2$$

(近似到 θ^2 项)

因此, 体系的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2} m(l\dot{\theta})^2 + \frac{1}{2} mgl \theta^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

其中,

$$x = l\theta, \quad \omega = \sqrt{\frac{g}{l}}, \quad \hat{p} = ml\dot{\theta}$$

由此可见, 质点的简谐振动能级

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n=1, 2, 3 \cdots$$

(2) 小角近似带来的势能的误差 (精确到 θ^4 项)

$$\begin{aligned} \Delta V = \hat{H}' &= mg(l - l \cos \theta) - \frac{1}{2} mgl \theta^2 = -mgl \frac{\theta^4}{4!} \\ &= -\frac{mgl}{24} \theta^4 = -\frac{mg}{24l^3} x^4 \end{aligned}$$

因此, 基态能量的一级修正值

$$\Delta E = \hat{H}'_{00} = -\left\langle 0 \left| \frac{mg}{24l^3} x^4 \right| 0 \right\rangle = -\frac{mg}{24l^3} \langle 0 | x^2 \cdot x^2 | 0 \rangle$$

利用

$$\begin{aligned} x^2 |n\rangle &= \frac{1}{2a^2} \left\{ \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + (2n+1) |n\rangle + \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle \right\} \\ x^2 |0\rangle &= \frac{1}{a^2} \left(\sqrt{\frac{1}{2}} |2\rangle + \frac{1}{2} |0\rangle \right), \quad a^2 = \frac{m\omega}{\hbar^2} \end{aligned}$$

得到

$$\langle 0 | x^4 | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} \right) = \frac{3\hbar^2}{4m^2 \omega^2}$$

因此, 最后得到能量的一级修正值

$$\Delta E = -\frac{mg}{32l^3} \cdot \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} = -\frac{\hbar^2}{32ml^2}$$

能量的一级近似值

$$E = E_0 + \Delta E = \frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{\hbar^2}{32ml^2}$$

量子力学自测题 (7) 参考答案

一、1、厄密算符的本征值是实数, 本征矢是正交、归一和完备的。

2、在无穷远处为零的状态为束缚态; 简并态是指一个本征值对应一个以上本征函数的情况; 将波函数中坐标变量改变符号, 若得到的新函数与原来的波函数相同, 则称该波函数具有偶宇称。

3、全同玻色子的波函数是对称波函数。两个玻色子组成的全同粒子体系的波函

数为: $\phi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_2) + \varphi_1(q_2)\varphi_2(q_1)]$

4、宇称算符 $\hat{P}$ 和坐标 x 的对易关系是: $[\hat{P}, x] = -2x\hat{P}$, 将其代入测不准关系知,

只有当 $\overline{x\hat{P}}=0$ 时的状态才可能使 $\hat{P}$ 和 x 同时具有确定值, 由 $\delta(x)=\delta(-x)$ 知, 波函数 $\delta(x)$ 满足上述要求, 所以 $\delta(x)$ 是算符 $\hat{P}$ 和 x 的共同本征函数。

5、设 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的对易关系 $\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}=ik$, k 是一个算符或普通的数。以 $\bar{F}$ 、 $\bar{G}$ 和 $\bar{k}$ 依次表示 $\hat{F}$ 、 $\hat{G}$ 和 k 在态 ψ 中的平均值, 令 $\Delta\hat{F}=\hat{F}-\bar{F}$, $\Delta\hat{G}=\hat{G}-\bar{G}$,

$$\text{则有 } \overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{\bar{k}^2}{4}, \text{ 这个关系式称为测不准关系。}$$

时间 t 和能量 E 之间的测不准关系为: $\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

二、1、由于 $\hat{A}^2=1$, 所以算符 $\hat{A}$ 的本征值是 ± 1 , 因为在 A 表象中, 算符 $\hat{A}$ 的

$$\hat{A}(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

矩阵是对角矩阵, 所以, 在 A 表象中算符 $\hat{A}$ 的矩阵是:

设在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的矩阵是 $\hat{B}(A) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$, 利用 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ 得:

$$b_{11}=b_{22}=0; \text{ 由于 } \hat{B}^2=1, \text{ 所以 } \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{12}b_{21} & 0 \\ 0 & b_{21}b_{12} \end{pmatrix} = 1,$$

$$\therefore b_{12} = \frac{1}{b_{21}}; \text{ 由于 } \hat{B} \text{ 是厄密算符, } \hat{B}^+ = \hat{B}, \therefore \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ \frac{1}{b_{12}} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{b_{12}^*} \\ b_{12}^* & 0 \end{pmatrix} \therefore b_{12} = \frac{1}{b_{12}^*}$$

令 $b_{12} = e^{i\delta}$, (δ 为任意实常数) 得 $\hat{B}$ 在 A 表象中的矩阵表示式为:

$$\hat{B}(A) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}$$

$$2、\text{在 A 表象中算符 } \hat{B} \text{ 的本征方程为: } \begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\text{即 } \begin{pmatrix} e^{i\delta} \beta \\ e^{-i\delta} \alpha \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -\lambda\alpha + e^{i\delta}\beta = 0 \\ e^{-i\delta}\alpha - \lambda\beta = 0 \end{cases} \quad \alpha \text{ 和 } \beta \text{ 不同时为零的条件是上述}$$

$$\text{方程的系数行列式为零, 即 } \begin{vmatrix} -\lambda & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0 \quad \therefore \lambda = \pm 1$$

$$\text{对 } \lambda=1 \text{ 有: } \varphi_B^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ 对 } \lambda=-1 \text{ 有: } \varphi_B^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{所以, 在 A 表象中算符 } \hat{B} \text{ 的本征值是 } \pm 1, \text{ 本征函数为 } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix} \text{ 和 } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$$

3、从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵就是将算符 $\hat{B}$ 在 A 表象中的本征函数按列

$$\text{排成的矩阵, 即 } S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} & e^{-i\delta} \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

三、解：1、 $t=0$ 的情况：已知线谐振子的能量本征解为：

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (n=0,1,2,\dots), \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(-\alpha^2 x^2) H_n(\alpha x)$$

$$\text{当 } n=0,1 \text{ 时有: } \varphi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp(-\alpha^2 x^2), \quad \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}} (\alpha x) \exp(-\alpha^2 x^2)$$

于是 $t=0$ 时的波函数可写成： $\psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{3}}\varphi_0(x) - \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_1(x)$ ，容易验证它是归一化的波函数，于是 $t=0$ 时的能量取值几率为：

$$W(E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, 0) = \frac{1}{3}, \quad W(E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega, 0) = \frac{2}{3}, \quad \text{能量取其他值的几率皆为零。}$$

$$\text{能量的平均值为: } \bar{E} = \frac{1}{3}E_0 + \frac{2}{3}E_1 = \frac{7}{6}\hbar\omega$$

$$2、t>0 \text{ 时体系波函数 } \psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{3}}\varphi_0(x) \exp(-\frac{i}{2}\omega t) - \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_1(x) \exp(-\frac{3i}{2}\omega t)$$

显然，哈密顿量为守恒量，它的取值几率和平均值不随时间改变，故 $t>0$ 时体系能量的取值几率和平均值与 $t=0$ 的结果完全相同。

$$\text{四、解：将矩阵改写成: } \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2\lambda & 0 \\ 2\lambda & \lambda & 3\lambda \\ 0 & 3\lambda & 2\lambda \end{pmatrix}$$

$$\text{能量的零级近似为: } E_1^{(0)} = 1, \quad E_2^{(0)} = 2, \quad E_3^{(0)} = 3$$

$$\text{能量的一级修正为: } E_1^{(1)} = 0, \quad E_2^{(1)} = \lambda, \quad E_3^{(1)} = 2\lambda$$

$$\text{能量的二级修正为: } E_1^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{|H'_{13}|^2}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = -4\lambda^2,$$

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{21}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|H'_{23}|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = 4\lambda^2 - 9\lambda^2 = -5\lambda^2,$$

$$E_3^{(2)} = \frac{|H'_{31}|^2}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|H'_{32}|^2}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = 9\lambda^2$$

$$\text{所以体系近似到二级的能量为: } E_1 \approx 1 - 4\lambda^2, \quad E_2 \approx 2 + \lambda - 5\lambda^2, \quad E_3 \approx 3 + 2\lambda + 9\lambda^2$$

$$\text{先求出 } \hat{H}_0 \text{ 属于本征值 } 1, 2 \text{ 和 } 3 \text{ 的本征函数分别为: } \varphi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\varphi_3^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

利用波函数的一级修正公式 $\varphi_k^{(1)} = \sum_{i \neq k} \frac{H'_{ik}}{E_k^{(0)} - E_i^{(0)}} \varphi_i^{(0)}$, 可求出波函数的一级修正

为:

$$\varphi_1^{(1)} = -2\lambda \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_2^{(1)} = \lambda \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -3 \end{pmatrix}, \quad \varphi_3^{(1)} = 3\lambda \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

近似到一级的波函数为:

$$\varphi_1 \approx \begin{pmatrix} 1 \\ -2\lambda \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_2 \approx \begin{pmatrix} 2\lambda \\ 1 \\ -3\lambda \end{pmatrix}, \quad \varphi_3 \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 3\lambda \\ 1 \end{pmatrix}$$

五、解：由玻色子组成的全同粒子体系，体系的波函数应是对称函数。以 q_i 表示第 i ($i=1,2,3$) 个粒子的坐标，根据题设，体系可能的状态有以下四个：

- (1) $\varphi_s^{(1)} = \phi_1(q_1)\phi_1(q_2)\phi_1(q_3)$; (2) $\varphi_s^{(2)} = \phi_2(q_1)\phi_2(q_2)\phi_2(q_3)$
 (3) $\varphi_s^{(3)} = C[\phi_1(q_1)\phi_1(q_2)\phi_2(q_3) + \phi_1(q_1)\phi_2(q_2)\phi_1(q_3) + \phi_1(q_2)\phi_2(q_1)\phi_1(q_3)]$;
 (4) $\varphi_s^{(4)} = C[\phi_2(q_1)\phi_2(q_2)\phi_1(q_3) + \phi_2(q_1)\phi_1(q_2)\phi_2(q_3) + \phi_2(q_2)\phi_2(q_3)\phi_1(q_1)]$

量子力学自测题 (8) 参考答案

一、填空题

1. 0, ∞

2. 是, $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, 否, $\cos kx = \frac{1}{2}(e^{ikx} + e^{-ikx})$, 可见, 它是两个动量本征态 e^{ikx}

和 e^{-ikx} 的叠加态

3. $\hat{A}^2, \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

4. $\psi(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ e^{ik \cdot r} - e^{-ik \cdot r} + [f(\theta) - f(\pi - \theta)] e^{-ikr} / r \}$,

$$\sigma(\theta) = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2$$

5. $\begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$, $|n_1\rangle|n_2\rangle$, $C_1|n_1\rangle + C_2|n_2\rangle$, E_1, E_2, E_1 或 $E_2, 1, 1$, $\frac{|C_1|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}$ 或

$$\frac{|C_2|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}$$

二、1. 解 可通过 Fourier 变换得到动量表象中坐标的本征函数：

$$\begin{aligned}
 \varphi_{x_0}(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \delta(x - x_0) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} px_0}
 \end{aligned}$$

可见，在动量表象中，坐标的本征值为 x_0 的本征函数是

$$\varphi_{x_0}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} px_0}$$

2. 由于电子在 $r \rightarrow r + dr$ 的球壳内出现的几率为 $P_{nl}(r)dr = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$ ，几率密度，即几率分布函数 $P_{nl}(r) = |R_{nl}(r)|^2 r^2$ ，对 1s 电子的径向几率最大的位置应有

$$\frac{dP_{10}(r)}{dr} = \frac{d}{dr} |R_{10}(r)|^2 r^2 = 0$$

把 $R_{10}(r)$ 代入上式得

$$\frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(2r - \frac{2}{a_0} r^2 \right) = 0$$

$$2r \left(1 - \frac{r}{a_0} \right) = 0$$

$$r=0 \text{ 或 } r=a_0 \quad (r=0 \text{ 舍去})$$

可见，1s 电子的径向几率最大的位置是 $r=a_0$ 。

三、1. 证明 因为

$$\hat{l}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{l}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \hat{l}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

因此，

$$\hat{l}_x \psi_1 = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) (y + iz) = i\hbar z + \hbar y = \hbar(y + iz) = \hbar \psi_1$$

可见， ψ_1 是 $\hat{l}_x$ 的本征值为 $\hbar$ 的本征态。同理可证明，

$$\hat{l}_y \psi_2 = \hbar \psi_2, \quad \hat{l}_z \psi_3 = \hbar \psi_3$$

2. 证明 在自旋态 χ 下， $\hat{S}_z$ 的平均值

$$\overline{S_z} = \chi^\dagger \hat{S}_z \chi = (a^* b^*) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (|a|^2 - |b|^2)$$

可见, 只要 $|a|^2 = |b|^2$, $\hat{S}_z$ 的平均值必为零。

四、1. 证明 由 $(\sigma \cdot A)(\sigma \cdot B) = A \cdot B + i\sigma \cdot (A \times B)$ 可看出, 当 $A=B$ 时,

$$(\sigma \cdot A)^2 = A^2 + i\sigma \cdot (A \times A)$$

当 A 的三个分量 A_x, A_y, A_z 互为对易时, 上式中的 $A \times A = 0$, 当 A 的三个分量 A_x, A_y, A_z 互为不对易时, $A \times A \neq 0$ 。

对 $(\sigma \cdot p)^2$, 由于 $p_i p_j = p_j p_i$ (对易), 所以

$$(\sigma \cdot p)^2 = p^2$$

但对 $(\sigma \cdot l)^2$, 由于 l 的三个分量不对易, 且有 $l \times l = i\hbar l$, 因此

$$(\sigma \cdot l) = l^2 + i\sigma \cdot (i\hbar l) = l^2 - \hbar \sigma \cdot l$$

2. 证明 根据平均值的定义,

$$\overline{A} = (\psi(t), \hat{A}\psi(t))$$

因此,

$$\begin{aligned} \frac{d\overline{A}}{dt} &= \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, \hat{A}\psi \right) + \left(\psi, \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\ &= \left(\frac{\hat{H}\psi}{i\hbar}, \hat{A}\psi \right) + \left(\psi, \hat{A} \frac{\hat{H}\psi}{i\hbar} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} (\hat{H}\psi, \hat{A}\psi) + \frac{1}{i\hbar} (\psi, \hat{A}\hat{H}\psi) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \{ (\psi, [\hat{A}, \hat{H}]\psi) \} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \end{aligned}$$

但由于 $\hat{A}$ 是守恒量, $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, 因此 $\frac{d\overline{A}}{dt} = 0$, $\hat{A}$ 的平均值不随时间改变。

五、解 我们已经知道, 对一维谐振子

$$\overline{T} = \overline{V} = \frac{1}{2} E$$

对谐振子的基态, 能量 $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$, 因此,

$$\overline{V} = \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{x^2} = \frac{1}{2} E_0 = \frac{\hbar \omega}{4}$$

由此得到

$$\omega = \frac{\hbar}{2mx^2}$$

但由于

$$(\Delta x)^2 = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = l^2, \quad (\text{因为 } \bar{x} = 0)$$

因此, 由基态跃迁到第一激发态所需能量为

$$\Delta E = E_1 - E_0 = \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2mx^2} = \frac{\hbar^2}{2ml^2}$$

六、解 (1) 电子的自旋磁矩与外磁场的相互作用 Hamilton 量

$$\hat{H} = -\mu_s \cdot \hat{B} = -\frac{e\hbar}{2m_e c} \sigma \cdot \hat{B}$$

因为, $\hat{B} = (B, 0, 0)$,

$$\hat{H} = -\frac{e\hbar}{2m_e c} \sigma \cdot B = \omega \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \omega \equiv \frac{|e|B}{2m_e c}$$

设在任意时刻, 电子的自旋波函数 $\chi = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$, 则 Schrödinger 方程为

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi(t) = \hat{H} \chi(t)$$

或

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \omega \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

由此得到

$$\frac{da(t)}{dt} = -i\omega b(t), \quad \frac{db(t)}{dt} = -i\omega a(t)$$

两式相加得

$$\frac{d}{dt}(a+b) = -i\omega(a+b)$$

两式相减得

$$\frac{d}{dt}(a-b) = i\omega(a-b)$$

因此

$$a(t)+b(t)=c_1 e^{-i\omega t}, \quad a(t)-b(t)=c_2 e^{-i\omega t}$$

因初始时刻 ($t=0$), 电子的自旋向 z 轴的正向极化,

$$|\uparrow_z\rangle = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$a(0)=1, b(0)=0$$

由此得到,

$$c_1=a(0)=1, c_2=b(0)=0$$

因此

$$\begin{cases} a(t)+b(t)=e^{-i\omega t} \\ a(t)-b(t)=e^{i\omega t} \end{cases}$$

$$\begin{cases} a(t)=\frac{1}{2}(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})=\cos \omega t \\ b(t)=\frac{1}{2}(e^{-i\omega t}-e^{i\omega t})=-i \sin \omega t \end{cases}$$

最后得到, 电子在任意时刻的自旋波函数为

$$\chi = \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ -i \sin \omega t \end{pmatrix} = \cos \omega t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - i \sin \omega t \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(2) 在 $\chi(t)$ 状态下, $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ 的平均值分别为

$$\overline{S_x} = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_x \chi = \frac{\hbar}{2} (\cos \omega t, i \sin \omega t) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ -i \sin \omega t \end{pmatrix} = 0$$

$$\overline{S_y} = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_y \chi = \frac{\hbar}{2} (\cos \omega t, i \sin \omega t) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ -i \sin \omega t \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \sin 2\omega t$$

$$\overline{S_z} = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_z \chi = \frac{\hbar}{2} (\cos \omega t, i \sin \omega t) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ -i \sin \omega t \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sin 2\omega t$$

(3) 在 $\chi(t)$ 态下 $\hat{S}_z$ 的测值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的几率是

$$P_z(\uparrow) = \left| \langle \uparrow_z | \chi(t) \rangle \right|^2 = \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ -i \sin \omega t \end{pmatrix} \right|^2 = \cos^2 \omega t$$

$\hat{S}_z$ 的测值为 $-\frac{\hbar}{2}$ 的几率是

$$P_z(\downarrow) = \left| \langle \downarrow_z | \chi(t) \rangle \right|^2 = \left| \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ -i \sin \omega t \end{pmatrix} \right|^2 = \sin^2 \omega t$$

因此,

$$P_z(\uparrow) + P_z(\downarrow) = 1$$

量子力学自测题 (9) 参考答案

一. 回答下列问题 (共 30 分, 第 1、2 小题各 10 分, 第 3、4 小题各 5 分)

1、下列波函数所描写的状态是否为定态? 并说明其理由。

$$(1)、\psi_1(x,t) = \varphi(x)e^{i\frac{E}{\hbar}t} + \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$(2)、\psi_2(x,t) = u(x)e^{i(x-\frac{E}{\hbar}t)} + v(x)e^{-i(x+\frac{E}{\hbar}t)}$$

答: (1) $\psi_1(x,t)$ 为非定态, 因 $|\psi_1(x,t)|^2 = 2|\varphi(x)|^2 \cos \frac{E}{\hbar}t$ 与 t 有关。 (5 分)

(2) $\psi_2(x,t)$ 为定态, 因 $|\psi_2(x,t)|^2 = |u(x)e^{ix} + v(x)e^{-ix}|^2$ 与 t 无关。 (5 分)

2、描写粒子状态的波函数在坐标表象中为 $\psi(\vec{r},t)$, 在动量表象中为

$C(\vec{p},t)$, 在力学量 $\mathbf{Q}$ 表象中为矩阵

$$A(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

且它们都是归一化的, 试指出 $|\psi(\vec{r},t)|^2$, $|C(\vec{p},t)|^2$ 与 $|a_n(t)|^2$ 的物理意义, 并分别写出用这三个波函数计算力学量 $F(\vec{r},\vec{p})$ 平均值的表示式。

答: $|\psi(\vec{r},t)|^2$ —— t 时刻粒子处在位置 $\vec{r}$ 处的概率。 (2 分)

$|C(\vec{p},t)|^2$ —— t 时刻粒子的动量取 $\vec{p}$ 值的概率。 (2 分)

$|a_n(t)|^2$ —— t 时刻测量粒子的力学量 F , 测得值为其本征值 F_n 的几率。

(2 分)

$$\overline{F} = \int \psi^*(\vec{r},t) \hat{F}(\vec{r},\vec{p}) \psi(\vec{r},t) d^3\vec{r} \quad (1 \text{ 分})$$

$$\overline{F} = \int C^*(\vec{p},t) \hat{F}(i\hbar\nabla_{\vec{p}},\vec{p}) C(\vec{p},t) d^3\vec{p} \quad (1 \text{ 分})$$

$$\overline{F} = A^\dagger F A \quad (2 \text{ 分})$$

3、已知 $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$, 试问 $\vec{L}_x$ 、 $\vec{L}_y$ 和 $\vec{L}_z$ 是否一定不能同时测定? 说明其原由或举例

说明。答: 不一定不能同时测定。例如在 $Y_{00}(\theta, \varphi)$ 状态中, $\vec{L}_x$ 、 $\vec{L}_y$ 和 $\vec{L}_z$ 可同时测定它们的测量值均为零。(5分)

4、量子力学的波函数与经典的波场有何本质性的区别?

答: 量子力学的波函数是一种概率波, 没有直接可测的物理意义, 它的模方表示概率, 才有可测的意义; 经典的波场代表一种物理场, 有直接可测的物理意义。(5分)

二、(15分) 在动表象中, 求线性谐振子的能量本征函数

Solve: $H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$

在动表象中 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\mu\omega^2 \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu} p^2$ (2分)

本征方程: $\left[-\frac{\mu^2\omega^2\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu} p^2 \right] \psi(p) = E\psi(p)$ (3分)

$$\frac{\mu^2\omega^2\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} \psi(p) + \left(E - \frac{1}{2\mu} p^2 \right) \psi(p) = 0$$

令 $\alpha = \sqrt{\frac{1}{\mu\omega\hbar}} \quad \lambda = \frac{2E}{\omega\hbar} \quad \xi = \alpha p$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0$$

该方程在 $-\infty < \xi < \infty$ 区域上存在有限解的条件是要求 $\lambda = 2n+1$

$\therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$ (3分)

本征函数: $\psi_n(p) = N_n e^{-\frac{\alpha^2}{2} p^2} H_n(\alpha p)$ (5分)

归一化常数: $N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2}$ (2分)

即 $\psi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}^{1/2} 2^n n! \sqrt{\omega \mu \hbar}} e^{-\frac{p^2}{2\omega \mu \hbar}} H_n \left(\frac{p}{\sqrt{\omega \mu \hbar}} \right)$

二、(15 分) 在动表象中, 求线性谐振子的能量本征函数

Solve: $H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$

在动表象中 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\mu\omega^2 \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu} p^2$ (2 分)

本征方程: $\left[-\frac{\mu^2\omega^2\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu} p^2 \right] \psi(p) = E\psi(p)$ (3 分)

$$\frac{\mu^2\omega^2\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} \psi(p) + \left(E - \frac{1}{2\mu} p^2 \right) \psi(p) = 0$$

令 $\alpha = \sqrt{\frac{1}{\mu\omega\hbar}} \quad \lambda = \frac{2E}{\omega\hbar} \quad \xi = \alpha p$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0$$

该方程在 $-\infty < \xi < \infty$ 区域上存在有限解的条件是要求 $\lambda = 2n+1$

$\therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$ (3 分)

本征函数: $\psi_n(p) = N_n e^{-\frac{\alpha^2}{2} p^2} H_n(\alpha p)$ (5 分)

归一化常数: $N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2}$ (2 分)

即 $\psi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!} \sqrt{\omega \mu \hbar}} e^{-\frac{p^2}{2\omega \mu \hbar}} H_n \left(\frac{p}{\sqrt{\omega \mu \hbar}} \right)$

能量一级修正: $E_1^{(1)} = H'_{11} = b \quad E_2^{(1)} = b$ (2 分)

能量二级修正: $E_1^{(2)} = \sum_m' \frac{|H'_{m1}|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$ (2 分)

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (2 \text{ 分})$$

能量二级近似: $E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = E_2^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

设 $\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_2^{(0)}$ 为零级近似波函数, 则波函数一级近似

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m1}}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_1^{(0)} + \frac{a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

$$\psi_2 = \psi_2^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m2}}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_2^{(0)} + \frac{a}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

直接计算: 设 $\hat{H}$ 的本征矢为 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, 本征值为 E , 则本征方程为:

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b & a \\ a & E_2^{(0)} + b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \quad (2 \text{ 分})$$

久期方程: $\begin{vmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3 \text{ 分})$

$$(E_1^{(0)} + b - E)(E_2^{(0)} + b - E) - a^2 = 0$$

$$E^2 - E(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) + [(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) - a^2] = 0$$

$$E = \frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \sqrt{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b)^2 - 4(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) + 4a^2}}{2}$$

能量一级修正: $E_1^{(1)} = H'_{11} = b \quad E_2^{(1)} = b \quad (2 \text{ 分})$

能量二级修正: $E_1^{(2)} = \sum_m' \frac{|H'_{m1}|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (2 \text{ 分})$

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (2 \text{ 分})$$

能量二级近似: $E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = E_2^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

设 $\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_2^{(0)}$ 为零级近似波函数，则波函数一级近似

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m1}}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_1^{(0)} + \frac{a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

$$\psi_2 = \psi_2^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m2}}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_2^{(0)} + \frac{a}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

直接计算：设 $\hat{H}$ 的本征矢为 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ ，本征值为 E ，则本征方程为：

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b & a \\ a & E_2^{(0)} + b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{久期方程：} \begin{vmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3 \text{ 分})$$

$$(E_1^{(0)} + b - E)(E_2^{(0)} + b - E) - a^2 = 0$$

$$E^2 - E(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) + [(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) - a^2] = 0$$

$$E = \frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \sqrt{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b)^2 - 4(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) + 4a^2}}{2}$$

$$= \frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \sqrt{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2 + 4a^2}}{2}$$

$$= \frac{1}{2} \left[(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm (E_1^{(0)} - E_2^{(0)}) \sqrt{1 + \left(\frac{2a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right)^2} \right]$$

$$= \frac{1}{2} (E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \frac{1}{2} (E_1^{(0)} - E_2^{(0)}) \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{2a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right)^2 + \dots \right] \quad (2 \text{ 分})$$

$$E_1 \approx E_1^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

$$E_2 \approx E_2^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

可见，用直接解能量算符本征方程的方法，求得的本征能量值在泰勒级数展

开的二级近似下与微扰法得到的能量二级近似值一致

五. (14 分) 一体系由三个全同玻色子组成, 玻色子之间无相互作用。玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个? 它们的波函数怎样用单粒子态构成?

解: 体系的可能状态有 4 个: (2 分)

$$\Phi_1(q_1, q_2, q_3) = \varphi_i(q_1)\varphi_i(q_2)\varphi_i(q_3) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\Phi_2(q_1, q_2, q_3) = \varphi_j(q_1)\varphi_j(q_2)\varphi_j(q_3) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\Phi_3(q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_i(q_1)\varphi_i(q_2)\varphi_j(q_3) + \varphi_i(q_2)\varphi_i(q_3)\varphi_j(q_1) + \varphi_i(q_3)\varphi_i(q_1)\varphi_j(q_2)] \quad (3 \text{ 分})$$

$$\Phi_4(q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_i(q_1)\varphi_j(q_2)\varphi_j(q_3) + \varphi_i(q_2)\varphi_j(q_3)\varphi_j(q_1) + \varphi_i(q_3)\varphi_j(q_1)\varphi_j(q_2)]$$

量子力学测试题 (10) 参考答案

1、一质量为 m 的粒子沿 x 正方向以能量 E 向 $x=0$ 处势垒运动。当 $x \leq 0$ 时, 势能为零; 当 $x > 0$ 时, 势能为 $V_0 = \frac{3}{4}E$ 。问在 $x=0$ 处粒子被反射的几率多大?

解: S-eq 为
$$\begin{cases} \psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0 & x \leq 0 \\ \psi_2'' + k_2^2 \psi_2 = 0 & x \geq 0 \end{cases} \quad \text{其中 } k_1^2 = 2mE/\hbar^2$$

$$k_2^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 = k_1^2/4$$

由题意知 $x \leq 0$ 区域 既有入射波, 又有反射波; $x \geq 0$ 区域仅有透射波

故方程的解为
$$\psi_1 = e^{ik_1x} + re^{-ik_1x} \quad x \leq 0$$

$$\psi_2 = te^{ik_2x} \quad x \geq 0$$

在 $x=0$ 处, ψ 及 ψ' 都连续, 得到 $1+r=t$ $k_1(1-r) = \frac{k_1}{2}t$ 由此解得

$$R = |r|^2 = \frac{1}{9}$$

注意 透射率 $T \neq |t|^2$ 因为 $k_2 \neq k_1$

将 e^{ik_1x} , re^{-ik_1x} , te^{ik_2x} 分别代入几率流密度公式 $j = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right)$

$$\begin{aligned} \text{得} \quad \text{入射粒子流密度} \quad j_0 &= \frac{\hbar k_1}{m} \\ \text{反射粒子流密度} \quad j_R &= -\frac{\hbar k_1}{m} |r|^2 \\ \text{透射粒子流密度} \quad j_T &= \frac{\hbar k_2}{m} |t|^2 \end{aligned}$$

$$\text{由此得} \quad \text{反射率} \quad R = \left| \frac{j_R}{j_0} \right| = |r|^2 = \frac{1}{9}$$

$$\text{透射率} \quad T = \left| \frac{j_T}{j_0} \right| = \frac{k_2}{k_1} |t|^2 = \frac{8}{9} \quad R + T = 1$$

2、计算

$$(1) [\bar{L}, r^2] = ?$$

$$(2) \text{ 设 } F(x, p) \text{ 是 } x, p \text{ 的整函数, 则 } [p, F] = ?$$

$$\text{解: } (1) [L_\alpha, r^2] = [L_\alpha, x_\beta x_\beta] = x_\beta [L_\alpha, x_\beta] + [L_\alpha, x_\beta] x_\beta = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\beta x_\gamma + i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\gamma x_\beta = 0$$

$$\text{因为将第二项哑标作更换 } \beta \leftrightarrow \gamma \quad i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\gamma x_\beta = i\hbar \varepsilon_{\alpha\gamma\beta} x_\beta x_\gamma = -i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\beta x_\gamma$$

$$\text{所以 } [\bar{L}, r^2] = 0$$

$$(2) \text{ 先由归纳法证明 } [p, x^n] = -i\hbar n x^{n-1} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x^n \quad (\bullet) \text{ 式}$$

$$n=1 \quad \text{上式显然成立; 设 } n=k \text{ 时上式成立, 即 } [p, x^k] = -i\hbar k x^{k-1}$$

$$\text{则 } [p, x^{k+1}] = [p, x^k] x + x^k [p, x] = -i\hbar k x^k - i\hbar x^k = -i\hbar (k+1) x^k$$

显然, $n=k+1$ 时上式也成立, $(\bullet)$ 式得证。

$$\text{因为} \quad F(x, p) = \sum_{m,n=0} C_{mn} x^m p^n$$

则

$$[p, F] = \sum_{m,n} C_{mn} [p, x^m p^n] = \sum_{m,n} C_{mn} [p, x^m] p^n = -i\hbar \sum_{m,n} C_{mn} m x^{m-1} p^n = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} F$$

3、试在氢原子的能量本征态 ψ_{nlm} 下, 计算 r^{-1} 和 r^{-2} 的平均值。

解: 处于束缚态 ψ_{nlm} 下的氢原子的能量

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{e^2}{2a} \frac{1}{n^2} \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad n = n_r + l + 1$$

(1) 计算 $\langle r^{-1} \rangle$

方法1 相应的维里定理为 $\langle T \rangle_{nlm} = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_{nlm} \quad E_n = \frac{1}{2} \langle V \rangle_{nlm}$

$$\text{所以 } \langle r^{-1} \rangle = -\frac{2E_n}{e^2} = \frac{1}{an^2}$$

方法2 选 Z 为参量 相应的 F-H 定理 $\frac{\partial E_n}{\partial e^2} = \langle \frac{\partial H}{\partial e^2} \rangle_{nlm}$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad -\frac{1}{an^2} = -\langle \frac{1}{r} \rangle_{nlm} \quad \langle r^{-1} \rangle = \frac{1}{an^2}$$

(2) 计算 $\langle r^{-2} \rangle$

$$\text{等效的一维哈密顿量} \quad H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

取 l 为参量 相应的 F-H 定理 $\frac{\partial E_n}{\partial l} = \langle \frac{\partial H_l}{\partial l} \rangle_{nlm}$ 注意

$$n = n_r + l + 1$$

$$\frac{e^2}{an^3} = \frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu} \langle r^{-2} \rangle \quad \langle r^{-2} \rangle = \frac{1}{(l+1/2)a^2 n^3}$$

4、有一个二能级体系，哈密顿量为 $H = H_0 + H'$ ， H_0 和微扰算符 H' 的矩阵表示为

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad H' = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

其中 λ 表征微扰强度， $E_1 \leq E_2$ 。用微扰法求 H 的本征值和本征态。

解：由于是对角化的，可见选用表象为 H_0 表象

对于 $E_1 < E_2$ ，由非简并微扰论计算公式

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_m' \frac{|H'_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \cdots \\ \psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + \cdots \end{cases}$$

得

$$E_1^{(1)} = 0$$

$$E_1^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{\lambda^2}{E_1 - E_2}$$

$$\psi_1^{(1)} = \frac{H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} = \frac{\lambda}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$E_2^{(1)} = 0$$

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{\lambda^2}{E_2 - E_1}$$

$$\psi_2^{(1)} = \frac{H'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} = \frac{\lambda}{E_2 - E_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

所以，二级近似能量和一级近似态矢为

$$E_1 + \frac{\lambda^2}{E_1 - E_2}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\lambda}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; E_2 + \frac{\lambda^2}{E_2 - E_1}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{\lambda}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}。$$

对于 $E_1 = E_2$ ，由简并微扰论计算得一级近似能量和零级近似态矢为

$$E_1 + \lambda, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; E_1 - \lambda, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}。$$

5、自旋投影算符 $S_n = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ ， $\vec{\sigma}$ 为泡利矩阵， $\vec{n}$ 为单位矢量 $(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ 。(1) 对电子自旋向上态 $\chi_+(s_z = \hbar/2)$ ，求 S_n 的可能值及相应几率；(2) 对 σ_n 的本征值为 1 的本征态，求 σ_y 的可能值及相应几率。

$$\text{解: (1) 由 } \hat{S}_n = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = m_s \hbar \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \text{ 得}$$

$$\chi_{\frac{1}{2}}(s_n) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad \chi_{-\frac{1}{2}}(s_n) = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

对于电子自旋向上态 $\chi_+(s_z = \hbar/2) = \alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ， S_n 取值 $\pm \frac{\hbar}{2}$ 的几率分别为

$$\left| \chi_{\frac{1}{2}}^+ \alpha \right|^2 = \left| \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

$$\left| \chi_{\frac{1}{2}}^+ \alpha \right|^2 = \left| \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} & -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

(2) σ_y 的本征值和本征态

$$\lambda = 1, \quad \chi_+(\sigma_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}; \quad \lambda = -1, \quad \chi_-(\sigma_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

电子处于 σ_n 的本征值为 1 的本征态 (即 S_n 的本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的本征态

$$\chi_{\frac{1}{2}}(s_n)),$$

则 σ_y 的可能值及相应几率为

$$\lambda = 1 \quad \left| \chi_+(\sigma_y) \chi_{\frac{1}{2}}(\sigma_n) \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad -i) \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2} (1 + \sin \theta \sin \varphi)$$

$$\lambda = -1 \quad \left| \chi_-(\sigma_y) \chi_{\frac{1}{2}}(\sigma_n) \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad i) \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2} (1 - \sin \theta \sin \varphi)$$

6、设质量为 m 的两个全同粒子作一维运动，它们之间的相互作用能为 $\frac{1}{2}a(x_1 - x_2)^2 (a > 0)$ 。

(1) 若粒子自旋为 0，写出它们的相对运动态的能量和波函数；

(2) 若粒子自旋 $s = 1/2$ ，写出它们的相对运动基态及第一激发态的能量和波函数。

解：体系的哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2}a(x_1 - x_2)^2$$

引入质心坐标 X 和相对坐标 x ： $X = \frac{1}{2}(x_1 + x_2) \quad x = x_1 - x_2$

在坐标变换 $x_1, x_2 \Rightarrow X, x$ 下，体系的哈密顿量变为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}ax^2 \quad M = 2m \quad \mu = m/2$$

相对运动哈密顿量为

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \alpha x^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \quad \omega = \sqrt{\frac{\alpha}{\mu}}$$

(1) 若粒子自旋为 0, 则相对运动态的能量和波函数为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \psi_n(x) = N_n e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2} H_n(\alpha x) \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu \omega}{\hbar}}$$

$$n = 0, 2, 4, \dots$$

限定 $n = 0, 2, 4, \dots$ 是为了保证波函数对交换 x_1 和 x_2 是对称的。

(2) 若粒子自旋 $s = 1/2$, 则相对运动态的能量和波函数为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi(x, S_z) = N_n e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2} H_n(\alpha x) |00\rangle \quad n = 0, 2, 4, \dots$$

$$\psi(x, S_z) = N_n e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2} H_n(\alpha x) \begin{cases} |11\rangle \\ |10\rangle \\ |1-1\rangle \end{cases} \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

其中

$$|11\rangle = \alpha(1)\alpha(2) \quad |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)]$$

$$|1-1\rangle = \beta(1)\beta(2) \quad |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)]$$

体系基态能量和波函数

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad \psi(x, S_z) = N_0 e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2} |00\rangle$$

体系第一激发态能量和波函数

$$E = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

量子力学自测题(11)答案

一、(30 分) 回答下列问题:

(1) 何谓微观粒子的波粒两象性?

解 微观粒子既不是粒子, 也不是波。更确切地说, 它既不是经典意义下

的粒子，也不是经典意义下的波，但是，它即具有经典粒子的属性（具有确定的质量、电荷与自旋），又具有经典波动的属性（具有干涉及衍射现象）。严格地说，微观粒子就是微观粒子，粒子与波只是微观粒子的两种不同属性。如果硬是要用经典的概念来理解它的话，那么，微观粒子既具有经典粒子的属性又具有经典波动的属性，是经典粒子与经典波动这一矛盾的综合体。

(2) 波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 是用来描述什么的？它应该满足什么样的自然条件？

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 的物理意义是什么？

解 波函数是用来描述体系状态的复函数，除了应满足平方可积的条件之外，它还应该是单值、有限和连续的。 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 表示在 t 时刻 $\vec{r}$ 附近 $d\tau$ 体积元中粒子出现的概率密度。

(3) 分别说明什么样的状态是束缚态、简并态与负宇称态？

解 当粒子在坐标趋向无穷远时，描述粒子状态的波函数趋向零，称之为粒子处于束缚态。若一个本征值对应一个以上不同的本征态，则称该本征值是简并的，所对应的本征态即为简并态，本征态的个数就是相应的简并度。将波函数中的坐标变量改变一个负号，若得到的新波函数与原波函数相差一个负号，则称其为负宇称态。

(4) 物理上可观测量应该对应什么样的算符？为什么？

解 物理上可观测量对应线性厄米算符。线性是状态叠加原理要求的，厄米算符的本征值是实数，可与（实数）观测值比较。

(5) 坐标 x 分量算符与动量 x 分量算符 $\hat{p}_x$ 是对易关系是什么？并写出两者满足的不确定关系。

解 对易关系为 $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$ 不确定关系为 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ 。

(6) 厄米算符 $\hat{F}$ 的本值 f_n 与本征矢 $|n\rangle$ 分别具有什么性质？

解 本征值为实数，本征矢构成正交、归一和完备的函数系。

二 (20 分) 设氢原子处于

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) - \frac{1}{2} R_{31}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{1-1}(\theta, \varphi)$$

的状态上，求能其量、角动量平方及角动量 Z 分量的可能取值与相应的取值概率，进而求出它们的平均值。

解 选 $\{H, L^2, L_z\}$ 为描述体系的力学量完全集，氢原子的本征解为

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$\varphi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

其中量子数的取值范围是

$n=1, 2, 3, \dots$; $l=0, 1, 2, \dots, n-1$; $m=l, l-1, l-2, \dots, -l+1, -l$

利用归一化条件求出归一化常数为

$$c = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \right)^{-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{4}{5}}$$

氢原子的能量只与主量子数 n 有关，依题可知， n 的可能取值有两个，即 $n=2, 3$ ，于是

$$E_2 = \frac{\mu e^4}{8\hbar^2}; \quad W(E_2) = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \frac{4}{5} = \frac{4}{5}$$

$$E_3 = \frac{\mu e^4}{18\hbar^2}; \quad W(E_3) = \frac{1}{4} \frac{4}{5} = \frac{1}{5}$$

$$\bar{E} = \frac{\mu e^4}{8\hbar^2} \frac{4}{5} - \frac{\mu e^4}{18\hbar^2} \frac{1}{5} = -\frac{\mu e^4}{9\hbar^2}$$

角动量量子数 l 的可能取值只有一个，即 $l=1$ ，故有

$$L^2 = 2\hbar^2; \quad W(L^2 = 2\hbar^2) = 1$$

$$\bar{L}^2 = 2\hbar^2$$

角动量磁量子数 m 的可能取值有两个，即 $m=-1, 0$ ，于是

$$L_z = -\hbar; \quad W(L_z = -\hbar) = \frac{1}{2} \frac{4}{5} = \frac{2}{5}$$

$$L_z = 0; \quad W(L_z = 0) = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} \right) \frac{4}{5} = \frac{3}{5}$$

$$\bar{L}^2 = -\frac{2}{5}\hbar^2$$

三、(25 分) 设厄米算符 $\hat{H}$ 的本征矢为 $|n\rangle$, $\{|n\rangle\}$ 构成正交归一完备函数系，定义一个算符

$$\hat{U}(m, n) = |m\rangle\langle n|$$

(1) 计算对易 $[\hat{H}, \hat{U}(m, n)]$

(2) 证明 $\hat{U}(m, n)\hat{U}^\dagger(p, q) = \delta_{nq}\hat{U}(m, p)$

(3) 计算阵迹 $\text{Tr} \hat{F} = \sum_k \langle k | \hat{F} | k \rangle$

(4) 若算符 $\hat{A}$ 的矩阵元为 $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$ ，证明

$$\hat{A} = \sum_{m,n} A_{mn} \hat{U}(m,n)$$

$$A_{pq} = T_r \{ \hat{A} \hat{U}^+(p,q) \}$$

解 (1) 对于任意一个态矢 $|\psi\rangle$, 有

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{U}(m,n)] |\psi\rangle &= \hat{H} \hat{U}(m,n) |\psi\rangle - \hat{U}(m,n) \hat{H} |\psi\rangle = \\ &= \hat{H} |m\rangle \langle n| \psi\rangle - |m\rangle \langle n| \hat{H} |\psi\rangle = \\ &= E_m \hat{U}(m,n) |\psi\rangle - E_n \hat{U}(m,n) |\psi\rangle = \\ &= (E_m - E_n) \hat{U}(m,n) |\psi\rangle \end{aligned}$$

故 $[\hat{H}, \hat{U}(m,n)] = (E_m - E_n) \hat{U}(m,n)$

$$(2) \quad \hat{U}(m,n) \hat{U}^+(p,q) = |m\rangle \langle n| q \rangle \langle p| = \delta_{nq} \hat{U}(m,p)$$

(3) 算符的阵迹为

$$\begin{aligned} Tr \{ \hat{U}(m,n) \} &= \sum_k \langle k | \hat{U}(m,n) | k \rangle = \\ &= \sum_k \langle k | m \rangle \langle n | k \rangle = \\ &= \sum_k \langle n | k \rangle \langle k | m \rangle = \langle n | m \rangle = \delta_{mn} \end{aligned}$$

(4) 算符

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_m |m\rangle \langle m| \hat{A} = \sum_{m,n} |m\rangle \langle m| \hat{A} |n\rangle \langle n| = \\ &= \sum_{m,n} A_{mn} \hat{U}(m,n) \end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned} A_{pq} &= \langle p | \hat{A} | q \rangle = \sum_k \langle p | k \rangle \langle k | \hat{A} | q \rangle = \\ &= \sum_k \langle k | \hat{A} | q \rangle \langle p | k \rangle = \sum_k \langle k | \hat{A} \hat{U}^+(p,q) | k \rangle = \\ &= Tr \{ \hat{A} \hat{U}^+(p,q) \} \end{aligned}$$

四、(25 分) 自旋为 $\frac{\hbar}{2}$, 固有磁矩为 $u = \gamma s$ (其中 γ 为实常数) 的粒子, 处于均匀外磁场 $\hat{B} = B_0 \hat{k}$ 中, 设 $t=0$ 时粒子处于 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 的状态。

- (1) 求出 $t>0$ 时的波函数;
 (2) 求出 $t>0$ 时 $\hat{s}_x$ 与 $\hat{s}_z$ 的可测值及相应的取值概率。

解 体系的哈密顿算符为

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \hat{\vec{B}} = -\gamma B_0 \hat{s}_z = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \hat{\sigma}_z \equiv \omega \hat{\sigma}_z$$

在泡利表象中, 哈密顿算符的本征解为

$$E_1 = \omega; \quad |\varphi_1\rangle = |+\rangle$$

$$E_2 = -\omega; \quad |\varphi_2\rangle = |-\rangle$$

- (1) 在 $t=0$ 时, 粒子处于 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 的状态, 即

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_x$$

式中, $|+\rangle_x$ 是 $\hat{\sigma}_x$ 相应于本征值为 1 的本征态。为了求出 $|+\rangle_x$ 在泡利表象中的具体形式, 需要求解 $\hat{\sigma}_x$ 满足的本征方程

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

解之得

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle + |-\rangle]$$

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle - |-\rangle]$$

于是有

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle + |-\rangle]$$

由于哈密顿算符不显含时间, 故 $t>0$ 时刻的波函数为

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right) |-\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega t\right) |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t\right) |-\rangle \end{aligned}$$

- (2) 因为 $[\hat{H}, \hat{s}_z] = 0$, 所以 s_z 是守恒量, 它的取值概率与平均值不随时间改

变。换句话说，只要计算出 $t=0$ 时， s_z 的取值概率，就知道了 $t>0$ 时 s_z 的取值概率。

由于

$$W\left(s_z = \frac{\hbar}{2}, 0\right) = \frac{1}{2}; \quad W\left(s_z = -\frac{\hbar}{2}, 0\right) = \frac{1}{2}$$

故有

$$\overline{s_z} = 0$$

s_x 的取值概率为

$$\begin{aligned} W\left(s_x = \frac{\hbar}{2}, t\right) &= \left| \langle + | \psi(t) \rangle \right|^2 = \\ &= \left| \frac{1}{2} \left[\left(\langle + | + \rangle + \langle + | - \rangle \right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega t\right) \langle + | + \rangle + \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t\right) \langle + | - \rangle \right] \right|^2 = \\ &= \left| \frac{1}{2} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega t\right) + \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t\right) \right] \right|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

而
$$W\left(s_x = -\frac{\hbar}{2}, t\right) = \sin^2\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right)$$

五、(25 分) 已知二维谐振子的哈密顿算符为 $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2(x^2 + y^2)$,

对其施加微扰 $\hat{W} = -\lambda xy$ 后，利用微扰论求 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ 基态能量至二级修正、第二激发态能量至一级修正。

提示： $\langle \varphi_m | x | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right]$ ，其中 $\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ $|\varphi_n\rangle$ 为线谐振子的第 n 个本征矢。

解 体系的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

其中

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2)$$

$$\hat{W} = -\lambda xy$$

已知 $\hat{H}_0$ 的解为

$$E_n^0 = (n+1)\hbar\omega$$

$$\psi_{n_1}(x, y) = \varphi_{n_1}(x)\varphi_{n_2}(y)$$

其中

$$n_1, n_2, n=0, 1, 2, \dots$$

$$i=1, 2, 3, \dots, f_n$$

将前三个能量与波函数具体写出来

$$E_0^0 = \hbar\omega; \quad \psi_0 = \varphi_0(x)\varphi_0(y)$$

$$E_1^0 = 2\hbar\omega; \quad \psi_{11} = \varphi_0(x)\varphi_1(y)$$

$$\psi_{12} = \varphi_1(x)\varphi_0(y)$$

$$E_2^0 = 3\hbar\omega; \quad \psi_{21} = \varphi_2(x)\varphi_0(y)$$

$$\psi_{22} = \varphi_0(x)\varphi_2(y)$$

$$\psi_{23} = \varphi_1(x)\varphi_1(y)$$

对于基态而言, $n_1=n_2=n=0, f_0=1$, 体系无简并。利用公式

$$x_{nm} = \langle \varphi_m | x | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right]$$

$$\text{可知 } E_0^{(1)} = \langle \psi_0 | \hat{W} | \psi_0 \rangle = 0, \quad E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \sum_{i=1}^{f_n} \frac{\langle \psi_0 | \hat{W} | \psi_{ni} \rangle \langle \psi_{ni} | \hat{W} | \psi_0 \rangle}{E_0^0 - E_n^0} \text{ 显然, 求和号}$$

$$\text{中不为零的矩阵元只有 } \langle \psi_0 | \hat{W} | \psi_{23} \rangle = \langle \psi_{23} | \hat{W} | \psi_0 \rangle = -\frac{\lambda}{2\alpha^2}$$

$$\text{于是得到 } E_0^{(2)} = \frac{1}{E_0^0 - E_2^0} \frac{\lambda^2}{4\alpha^4} = -\frac{\lambda^2 \hbar}{8\mu^2 \omega^3}$$

第二激发态为 3 度简并, 在简并子空间中, 能量一级修正满足的久期方程

$$\begin{vmatrix} W_{11} - E_2^{(1)} & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & W_{22} - E_2^{(1)} & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & W_{33} - E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{其中 } W_{11}=W_{22}=W_{33}=W_{12}=W_{21}=0; \quad W_{13}=W_{31}=W_{23}=W_{32} = -\frac{\lambda}{\sqrt{2}\alpha^2}$$

于是得到 $E_{21}^{(1)} = -\frac{\lambda}{\alpha^2}$; $E_{22}^{(1)} = 0$;

量子力学自测题(12) 参考答案

一、填空题

1. 矢量, 算符, 厄米, 本征值, 态的叠加
2. 力学量, Hamilton 量, 状态, 状态, 本征态

二、

1. 证明 全同粒子的不可区分性体现在体系 Hamilton 量的交换对称性。也

就是说, $\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1)$

因此, $\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2)\psi(1,2) = \hat{H}(2,1)\psi(2,1) = \hat{H}(1,2)\hat{P}_{12}\psi(1,2)$

由此得到, $(\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2) - \hat{H}(1,2)\hat{P}_{12})\psi(1,2) = 0$; $[\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2)]\psi(1,2) = 0$

所以 $[\hat{P}_{12}\hat{H}] = 0$, $\hat{P}_{12}$ 为守恒量

$$2. \text{ 证明 } \hat{H}^+ = \left(i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} \cdot \hat{U}^+ \right)^+ = -i\hbar \left(\hat{U} \frac{d\hat{U}^+}{dt} \right) = -i\hbar \left[\frac{d}{dt}(\hat{U}\hat{U}^+) - \frac{d\hat{U}^+}{dt} \cdot \hat{U}^+ \right]$$

因为 $\hat{H}$ 是幺正的, $\hat{U}\hat{U}^+ = 1$, 所以 $\frac{d}{dt}(\hat{U}\hat{U}^+) = 0$, 因此 $\hat{H}^+ = i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} \cdot \hat{U}^+ = \hat{H}$

可见 $\hat{H}$ 为厄米算符。

$$3. \text{ 证明 (1) } e^{i\theta\sigma_y} = 1 + i\theta\sigma_y - \frac{1}{2!}\theta^2\sigma_y^2 - \frac{i}{3!}\theta^3\sigma_y^3 + \dots$$

$$= \left(1 - \frac{1}{2!}\theta^2 + \frac{\theta^4}{4!} - \dots \right) + i\sigma_y \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots \right)$$

$$= \cos\theta + i\sigma_y \sin\theta$$

$$(2) \text{ 由于 } \cos\theta + i\sigma_y \sin\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$\text{因此, } \text{Tre}^{i\theta\sigma_y} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} = 2\cos\theta;$$

三、证明 因为

$$\hat{l}_x\psi = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi = -i\hbar(y-z)$$

$$\hat{l}_y \psi = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi = -i\hbar(z - x)$$

$$\hat{l}_z \psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = -i\hbar(x - y)$$

由此得到 $\hat{l}_x^2 \psi = \hbar^2(y + z)$, $\hat{l}_x^2 \psi = \hbar^2(z + x)$, $\hat{l}_x^2 \psi = \hbar^2(x + y)$

因此, $\hat{l}^2 \psi = \hat{l}_x^2 \psi + \hat{l}_y^2 \psi + \hat{l}_z^2 \psi = 2\hbar(x + y + z) = 2\hbar^2 \psi$

可见, $\psi = x + y + z$ 是 $\hat{l}^2$ 的本征值为 $2\hbar^2$ 的本征函数。

四、解 先把 $\psi(\theta, \varphi)$ 用球谐函数展开如下:

$$\begin{aligned} \psi(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (e^{i\varphi} \sin \theta + \cos \theta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sqrt{2} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-\sqrt{2} Y_{11} + Y_{10}) = \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} - \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} \end{aligned}$$

可见, 体系的 $l=1$, $m=0, 1$ 。因此, $\hat{l}_z$ 的可能测值为 0 或 $\hbar$, 出现 0 的几率为 $\frac{1}{3}$, 出现 $\hbar$ 的几率为 $\frac{2}{3}$ 。 $\hat{l}_z$ 的平均值为 $\bar{l}_z = \frac{2}{3}\hbar + \frac{1}{3} \cdot 0 = \frac{2}{3}\hbar$;

五、解 受到微扰 $\hat{H}'$ 的作用后基态能量的一级修正值为

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \hat{H}'_{11} = (\psi_1, \hat{H}' \psi_1) \\ &= \int_0^{\frac{a}{2}} \psi_1^* \hat{H}' \psi_1 dx + \int_{\frac{a}{2}}^a \psi_1^* \hat{H}' \psi_1 dx \\ &= \frac{4k}{a^2} \int_0^{\frac{a}{2}} x \sin^2 \frac{\pi}{a} x dx + \frac{4k}{a^2} \int_{\frac{a}{2}}^a (a-x) \sin^2 \frac{\pi}{a} x dx \\ &= \frac{2k}{a^2} \int_0^{\frac{a}{2}} x \left(1 - \cos \frac{2\pi}{a} x \right) dx + \frac{2k}{a^2} \int_{\frac{a}{2}}^a (a-x) \left(1 - \cos \frac{2\pi}{a} x \right) dx \end{aligned}$$

$$= \frac{2k}{a^2} \left[\frac{a^2}{8} + \frac{a^2}{\pi^2} + \frac{a^2}{8} \right] = k \left(\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2} \right)$$

六、解 (1) 利用公式: $x|n\rangle = \frac{1}{a} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} |n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} |n-1\rangle \right]$

$$\begin{aligned} \text{得到 } x^2|n\rangle &= \frac{1}{a} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} x|n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} x|n-1\rangle \right] \\ &= \frac{1}{a^2} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \left(\sqrt{\frac{n+2}{2}} |n+2\rangle + \sqrt{\frac{n+1}{2}} |n\rangle \right) + \\ &= \frac{1}{a^2} \sqrt{\frac{n}{2}} \left(\sqrt{\frac{n}{2}} |n\rangle + \sqrt{\frac{n-1}{2}} |n-2\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2a^2} \left[\sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + (2n+1) |n\rangle + \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} \right] \end{aligned}$$

$$\text{由此可见 } \langle 2|x^2|0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2a^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\omega}$$

(2) 在一级近似下, 体系从能级 E_0 跃迁到 E_n 的跃迁振幅为:

$$a_{n0}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle n|H'|0\rangle e^{i\omega_{n0}t} dt$$

其中, $\omega_{n0} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_0)$ 。因此, 从基态 $|0\rangle$ 跃迁振幅

$$\begin{aligned} a_{20}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle 2|x^2|0\rangle e^{(i\omega_{20}-2k)t} dt = \frac{\langle 2|x^2|0\rangle}{i\hbar} \int_0^t e^{(i\omega_{20}-2k)t} dt \\ &= \frac{\langle 2|x^2|0\rangle}{i\hbar} \cdot \frac{e^{(i\omega_{20}-2k)t}}{i\omega_{20}-2k} \Big|_0^t = \frac{\langle 2|x^2|0\rangle (e^{(i\omega_{20}-2k)t} - 1)}{i\hbar(i\omega_{20}-2k)} \end{aligned}$$

$$\text{经充分长时间后 } (t \rightarrow \infty), \quad a_{20}(t \rightarrow \infty) = -\frac{\langle 2|x^2|0\rangle}{i\hbar} \frac{1}{i\omega_{20}-2k}$$

$$\begin{aligned} \text{因此, 跃迁几率为 } P_{20}(\infty) &= |a_{20}(\infty)|^2 = \frac{1}{2m^2\omega^2} \cdot \frac{1}{4k^2 + \omega_{20}^2} \\ &= \frac{1}{2m^2\omega^2} \cdot \frac{\hbar^2}{4k^2\hbar^2 + (E_2 - E_0)^2} \\ &= \frac{1}{2m^2\omega^2} \cdot \frac{\hbar^2}{4\hbar^2k^2 + 4\hbar^2\omega^2} = \frac{1}{8m^2\omega^2(k^2 + \omega^2)} \end{aligned}$$

量子力学自测题 (13) 参考答案

一、(20分) 质量为 m 的粒子做一维自由运动, 如果粒子处于 $\psi(x) = A \sin^2(kx)$ 的状态上, 求其动量 p 与动能 T 的取值概率分布及平均值。

解 做一维自由运动粒子的动量与动能算符分别为 $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$; $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

显然两者相互对易, 有共同完备本征函数 $\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right)$

分别满足 $\hat{p}\varphi_p(x) = p\varphi_p(x)$, $\hat{T}\varphi_p(x) = \frac{p^2}{2m}\varphi_p(x)$

将 $\psi(x)$ 向 $\varphi_p(x)$ 展开, 即 $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c_p \varphi_p(x) dp$

$$\begin{aligned} \text{展开系数: } c_p &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x) \psi(x) dx = A \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x) \left[\frac{\exp(ikx) - \exp(-ikx)}{2i} \right]^2 dx \\ &= -\frac{A}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x) [\exp(2ikx) - 2 + \exp(-2ikx)] dx \\ &= -\frac{A}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x) \sqrt{2\pi\hbar} [\varphi_{2kh}(x) - 2\varphi_0(x) + \varphi_{-2kh}(x)] dx \\ &= -\frac{A}{4} \sqrt{2\pi\hbar} [\delta(p - 2kh) - 2\delta(p - 0) + \delta(p + 2kh)] \end{aligned}$$

只有当 $p=0, \pm 2k\hbar$ 时, $c_p \neq 0$ 。利用归一化条件 $\sum_p |c_p|^2 = 1$

可知, 归一化常数为 $A = \sqrt{\frac{4}{3\pi\hbar}}$

于是归一化后的展开系数为 $c_{2kh} = -\sqrt{\frac{1}{6}}$; $c_0 = \sqrt{\frac{2}{3}}$; $c_{-2kh} = -\sqrt{\frac{1}{6}}$

动量的取值概率为

$$W(p = 2k\hbar) = \frac{1}{6}; \quad W(p = 0) = \frac{2}{3}; \quad W(p = -2k\hbar) = \frac{1}{6}$$

平均值为 $\bar{p} = \sum_p p W(p) = 0$

动能的取值概率与动量相同，而平均值为 $\bar{T} = \sum_p \frac{p^2}{2m} W(p) = \frac{2k^2 \hbar^2}{3m}$

二、(20 分) 质量为 m 的粒子处于如下一维势阱中

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 \leq x \leq a) \\ V_0 (> 0) & (x > a) \end{cases}$$

若已知粒子在此势阱中存在一个能量 $E = \frac{V_0}{2}$ 的本征态，试确定此势阱的宽度 a 。

解 对于 $E = \frac{V_0}{2} < V_0$ 的情况，三个区域中的波函数分别为

$$\psi_1(x) = 0$$

$$\psi_2(x) = A \sin(kx + \delta)$$

$$\psi_3(x) = B \exp(-\alpha x) + C \exp(\alpha x)$$

$$\text{其中 } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

当 $x \rightarrow \infty$ 时， $\psi_3(x) = 0$ ，于是 $C=0$ 。

在 $x=0$ 处， $\psi_1(x) = \psi_2(x)$ ，故有， $A \sin \delta = 0$ ，即 $\delta = n\pi$ ，于是波函数简化为

$$\psi_1(x) = 0$$

$$\psi_2(x) = A \sin(kx + n\pi) = A' \sin(kx)$$

$$\psi_3(x) = B \exp(-\alpha x)$$

在 $x=a$ 处，利用波函数及其一阶导数连续的条件

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

得到

$$A' \sin(ka) = B \exp(-\alpha a)$$

$$A' k \cos(ka) = -B \alpha \exp(-\alpha a)$$

于是有 $\tan(ka) = -\frac{k}{\alpha}$

此即能量本征值满足的超越方程。

$$\text{当 } E = \frac{1}{2}V_0 \text{ 时, 由于 } \tan\left(\sqrt{\frac{mV_0}{\hbar}}a\right) = -\frac{\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}}{\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}} = -1$$

$$\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}a = n\pi - \frac{\pi}{4} \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

$$\text{最后得到势阱的宽度 } a = \left(n - \frac{1}{4}\right) \frac{\pi\hbar}{\sqrt{mV_0}}$$

三、(20 分) 在三维希尔伯特空间中, 已知两个算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{B}$ 的矩阵形式为

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{B} = b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

其中 b 、 ω 为实常数。证明算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{B}$ 是厄米算符, 并且两者相互对易, 进而求出它们的共同本征函数。

解: 由厄米算符的定义知, 厄米算符 $\hat{F}$ 满足 $\hat{F}^+ = \hat{F}$ 或者 $F_{mn} = (F_{nm})^*$,

题中所给出的算符 $\hat{H}$ 和算符 $\hat{B}$ 皆为实对称矩阵, 故它们都是厄米算符。

$$\text{因为 } \hat{H}\hat{B} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\omega b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{而 } \hat{B}\hat{H} = b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar\omega b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

所以有 $[\hat{H}, \hat{B}] = 0$

$$\text{设 } \hat{H} \text{ 满足的本征方程为 } \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

由于 $\hat{H}$ 是对角矩阵, 所以它的本征值就是其对角元, 即

$$E_1 = \hbar\omega$$

$$E_2 = -\hbar\omega$$

$$E_3 = -\hbar\omega$$

其中 $E_2=E_3$ ，该本征值具有二度简并。由于简并的存在，仅由算符 $\hat{H}$ 不能惟一确定 E_2 、 E_3 的波函数。

$$\text{当 } E_1 = \hbar\omega \text{ 时, 由本征方程可知, } c_1=1, \quad c_2=c_3=0, \text{ 于是波函数为 } \psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{进而得到 } \hat{B}\psi_1 = b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -b\psi_1$$

上式说明 ψ_1 也是算符 $\hat{B}$ 的本征波函数，对应的本征值为 $-b$ 。由此看来， ψ_1 是算符 $\hat{H}$ 与 $\hat{B}$ 的共同本征函数，对应的本值分别为 $E_1 = \hbar\omega$ 和 $B_1 = -b$ 。

当 $E_2=E_3=-\hbar\omega$ 时，波函数 ψ_2 、 ψ_3 无法惟一确定，它们的矩阵形式是一样的，

$$\text{为简洁起见, 统一记为 } \psi_{23} = \begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

用算符 $\hat{B}$ 作用上式，得到其满足的本征方程

$$\hat{B}\psi_{23} = b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

$$\text{在简并子空间中, 久期方程为 } \begin{vmatrix} -B & b \\ b & -B \end{vmatrix} = 0$$

得到 B 的另外两个本征值，分别记为 $B_2=b$ ； $B_3=-b$

$$\text{当 } B_2=b \text{ 时, 将其代入本征方程, 有 } b \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

得到

$$d_2=d_3$$

由归一化条件知

$$|d_2|^2 + |d_3|^2 = 1$$

进而得到

$$d_2 = d_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

将其代入 ψ_{23} 的表达式, 有
$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

当 $B_3 = -b$ 时, 重复上面的求解过程, 可以得到
$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

综上所述, 算符 $\hat{H}$ 与 $\hat{B}$ 的本征值都是二度简并的, 本征波函数皆不能惟一确定, 但因为它们相互对易, 所以有共同完备本征函数系, 它们的共同本征函数是惟一确定的, 用公式表示如下

$$\left. \begin{matrix} \hat{H} \\ \hat{B} \end{matrix} \right\} \psi_1 = \begin{matrix} \hbar\omega \\ -b \end{matrix} \left. \right\} \psi_1$$

$$\left. \begin{matrix} \hat{H} \\ \hat{B} \end{matrix} \right\} \psi_2 = \begin{matrix} -\hbar\omega \\ b \end{matrix} \left. \right\} \psi_2$$

$$\left. \begin{matrix} \hat{H} \\ \hat{B} \end{matrix} \right\} \psi_3 = \begin{matrix} -\hbar\omega \\ -b \end{matrix} \left. \right\} \psi_3$$

四、(20 分) 固有磁矩为 $\bar{M}$ 的电子, $t=0$ 时处于 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 的状态, 同时进入均匀磁场 $\bar{B} = B_0 \bar{k}$ 中。给出 $t>0$ 时的波函数, 在此状态下测量 s_z 得 $-\frac{\hbar}{2}$ 的概率是多少。

解 第一步, 解定态薛定谔方程。

这是一个讨论自旋状态随时间演变的问题, 故可以不顾及空间自由度。磁矩与外磁场相互作用引起一个附加能量, 与自旋相关的哈密顿算符为

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \bar{B} = \frac{e}{m} \hat{s} \cdot (B_0 \bar{k}) = \frac{e}{m} B_0 \hat{s}_z$$

其中 e 、 m 分别为电子的电荷的绝对值与质量。若令 $\omega_0 = \frac{e}{m} B_0$

则哈密顿算符可简化为 $\hat{H} = \omega_0 \hat{s}_z$

在 s_z 表象中, 哈密顿算符是对角矩阵, 它的解可以直接写出

$$E_1 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0; \quad |\varphi_1\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_2 = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0; \quad |\varphi_2\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

第二步, 写出任意时刻的波函数。

依题意知 $|\Psi(0)\rangle = |+\rangle_x$

式中 $|+\rangle_x$ 是在 s^2 、 s_x 表象中 $\hat{s}_x$ 的 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 的本征矢。为了将其在 s_z 表象中表示出来，

必须求解 $\hat{s}_x$ 满足的本征方程，即 $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

解之得 $s_x = \pm \frac{\hbar}{2}$ ，对应的本征矢分别为

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \quad |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle)$$

在 s_z 表象中，初态为 $|\Psi(0)\rangle = |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

于是 $t > 0$ 时刻的波函数为 $|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \exp\left(-\frac{i}{2} \omega_0 t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle \exp\left(\frac{i}{2} \omega_0 t\right)$

第三步，求在 $|\Psi(t)\rangle$ 态上测量， s_z 得 $-\frac{\hbar}{2}$ 的概率。

在 $|\Psi(t)\rangle$ 态上测量 s_z 得 $-\frac{\hbar}{2}$ 的概率为 $W(s_z = -\frac{\hbar}{2}, t) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{2} \omega_0 t\right) \right|^2 = \frac{1}{2}$

实际上，由于 s_z 的守恒量，故其取值概率不随时间改变。

五、(20 分) 一个电荷为 q 、质量为 μ 和角频率为 ω 的线谐振子，受到恒定弱电

场 ε 的作用，即 $\hat{W} = -q\varepsilon x$ ，求其能量近似到二级修正，波函数近似到一级修正。

解 体系的哈密顿算符与微扰算符分别为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

$$\hat{W} = -q\varepsilon x$$

$\hat{H}_0$ 的解为 $E_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$; $|n\rangle$

由于 $\hat{H}_0$ 的解无简并，可以利用无简并微扰论的计算公式

$$E_k \approx E_k^0 + W_{kk} + \sum_{n \neq k} \frac{W_{kn} W_{nk}}{E_k^0 - E_n^0}$$

进行计算。由 $\langle m|x|n\rangle = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right]$

$$\text{可知 } W_{mn} = -\frac{q\varepsilon}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right]$$

显然能量一级修正 $W_{kk} = 0$

$$\begin{aligned} \text{能量的二级修正为 } E_k^{(2)} &= \sum_{n \neq k} \frac{W_{kn} W_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} \\ &= \left(\frac{q\varepsilon}{\alpha} \right)^2 \sum_{n \neq k} \frac{\left[\sqrt{\frac{k}{2}} \delta_{n,k-1} + \sqrt{\frac{k+1}{2}} \delta_{n,k+1} \right]^2}{E_k^0 - E_n^0} \\ &= \left(\frac{q\varepsilon}{\alpha} \right)^2 \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{n \neq k} \frac{1}{k-n} \left[\frac{k}{2} \delta_{n,k-1} + \frac{k+1}{2} \delta_{n,k+1} \right] \\ &= \frac{q^2 \varepsilon^2}{\mu\omega^2} \left[\frac{k}{2} + \frac{k+1}{2} \right] = -\frac{q^2 \varepsilon^2}{2\mu\omega^2} \end{aligned}$$

近似到二级修正的能量本征值为 $E_k \approx \left(k + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2\mu\omega^2}$

此结果与习题选讲 3.4 得到的精确解完全一致。

$$\begin{aligned} \text{波函数的近似值为 } \psi_k(x) &\approx |k\rangle + \sum_{n \neq k} \frac{W_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} |n\rangle \\ &= |k\rangle - \frac{q\varepsilon}{\alpha\hbar\omega} \sum_{n \neq k} \frac{1}{k-n} \left[\sqrt{\frac{k}{2}} \delta_{n,k-1} + \sqrt{\frac{k+1}{2}} \delta_{n,k+1} \right] |n\rangle \\ &= |k\rangle + \frac{q\varepsilon}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \left[\sqrt{\frac{k+1}{2}} |k+1\rangle - \sqrt{\frac{k}{2}} |k-1\rangle \right] \end{aligned}$$

量子力学自测题 (14) 参考答案

一、(25 分) 质量 m 的粒子, 在阱宽为 a 的非对称一维无限深方势阱中运动, 当 $t=0$ 时, 粒子处于状态 $\psi(x,0) = \frac{1}{2}\varphi_1(x) - \frac{1}{4}\varphi_2(x) + \frac{1}{4}\varphi_3(x)$

其中, $\varphi_n(x)$ 为粒子的第 n 个能量本征态。

- (1) 求 $t=0$ 时能量的取值概率;
- (2) 求 $t>0$ 时的波函数 $\psi(x,t)$;
- (3) 求 $t>0$ 时能量的取值概率。

解 非对称一维无限深方势阱中粒子的本征解为

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n=1, 2, 3\cdots)$$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

(1) 首先将 $\psi(x,0)$ 归一化, 由 $\left[\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(-\frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2\right]|c|^2 = 1$

可知归一化常数为 $c = \sqrt{\frac{8}{3}}$

于是归一化后的波函数为 $\psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_1(x) - \sqrt{\frac{1}{6}}\varphi_2(x) + \sqrt{\frac{1}{6}}\varphi_3(x)$

能量的取值概率为 $W(E_1) = \frac{2}{3}$; $W(E_2) = \frac{1}{6}$; $W(E_3) = \frac{1}{6}$

能量取其它值的概率皆为零。

(2) 因为哈密顿算符不显含时间, 故 $t>0$ 时的波函数为

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_1(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_1t\right) - \sqrt{\frac{1}{6}}\varphi_2(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_2t\right) + \sqrt{\frac{1}{6}}\varphi_3(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_3t\right)$$

(3) 因为哈密顿量是守恒量, 所以 $t>0$ 时的取值概率与 $t=0$ 时相同。

二、(25 分) 设体系的哈密算符改写为 $\hat{H} = \frac{1}{2I_1}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \frac{1}{2}\hat{L}_z^2) + \frac{1}{2I_2}\hat{L}_z^2$

利用适当的变换求出体系的能量本征值与相应的本征矢。

解 将哈密顿算符改写为

$$\hat{H} = \frac{1}{2I_1}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) + \left(\frac{1}{2I_2} - \frac{1}{4I_1}\right)\hat{L}_z^2 = \frac{1}{2I_1}\hat{L}^2 + \left(\frac{1}{2I_2} - \frac{1}{4I_1}\right)\hat{L}_z^2$$

显然, $\{H, L^2, L_z\}$ 构成力学量完全集, 且其共同本征函数系为 $\{Y_{lm}(\theta, \varphi)\}$, 于是

$$\begin{aligned} \hat{H}Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \left[\frac{1}{2I_1}\hat{L}^2 + \left(\frac{1}{2I_2} - \frac{1}{4I_1}\right)\hat{L}_z^2\right]Y_{lm}(\theta, \varphi) = \\ &= \left[\frac{1}{2I_1}l(l+1)\hbar^2 + \left(\frac{1}{2I_2} - \frac{1}{4I_1}\right)m^2\hbar^2\right]Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

进而可知能量本征值为 $E_{lm} = \left[\frac{1}{2I_1}l(l+1) + \left(\frac{1}{2I_2} - \frac{1}{4I_1}\right)m^2\right]\hbar^2$

相应的本征矢为球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 。

三、(25 分) 自旋为 $\frac{\hbar}{2}$, 固有磁矩为 $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$ (γ 为实常数) 的粒子, 处于均匀外磁场 $\vec{B} = B_0 \vec{j}$ 中。设 $t=0$ 时粒子处于 $s_z = \frac{\hbar}{2}$ 的状态, 求出 $t > 0$ 时的波函数, 进而计算 $\hat{s}_x$ 与 $\hat{s}_z$ 的平均值。

解 体系的哈密顿算符为 $\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = -\gamma B_0 \hat{s}_y = -\frac{1}{2} \gamma B_0 \hbar \hat{s}_y = \omega \hat{s}_y$

式中 $\omega = -\frac{1}{2} \gamma B_0 \hbar$

在泡利表象中, 哈密顿算符的矩阵形式为 $\hat{H} = \omega \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

其本征值 E 满足久期方程 $\begin{vmatrix} -E & -i\omega \\ i\omega & -E \end{vmatrix} = 0$

解之得到 $E_1 = \omega$; $E_2 = -\omega$

将 $E_1 = \omega$ 和 $E_2 = -\omega$ 分别代入本征方程, 可以求出相应的本征矢

$$|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}; \quad |\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

依题意可知 $|\varphi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle]$

显然展开系数为 $C_1(0) = C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$t > 0$ 时的波函数为:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{n=1}^2 C_n(0) |\varphi_n\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega t\right) |\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t\right) |\varphi_2\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega t\right) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t\right) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega t\right) + \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t\right) \right] \\ \frac{i}{2} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega t\right) - \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t\right) \right] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \\ \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) \end{pmatrix}$$

将 $\omega = -\frac{1}{2} B_0 \hbar \gamma$ 代入上式, 得到 $|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \\ -\sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix}$

$\hat{s}_x$ 的平均值为 $\langle \psi(t) | \hat{s}_x | \psi(t) \rangle$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right), -\sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \\ -\sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right), -\sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \\ \sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \cos(B_0 \gamma t) \end{aligned}$$

$\hat{s}_x$ 的平均值为

$$\langle \psi(t) | \hat{s}_x | \psi(t) \rangle =$$

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right), -\sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \\ -\sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} = \\ &\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right), -\sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \\ \sin\left(\frac{1}{2} B_0 \gamma t\right) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos(B_0 \gamma t) \end{aligned}$$

四、(25 分) 各向同性三维谐振子的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$$

加上微扰 $\hat{W} = -\lambda(xy + yz + zx)$ 之后, 求第一激发态的一级能量修正。

解 无微扰时, 三维谐振子的本征解为

$$E_n^0 = \left(n + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}(y) \varphi_{n_3}(z)$$

当 $n=1$ 时，第一激发态存在 3 度简并，即

$$E_1^0 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

$$|1\rangle = \psi_1^0(x, y, z) = \varphi_0(x) \varphi_0(y) \varphi_1(z)$$

$$|2\rangle = \psi_2^0(x, y, z) = \varphi_0(x) \varphi_1(y) \varphi_0(z)$$

$$|3\rangle = \psi_3^0(x, y, z) = \varphi_1(x) \varphi_0(y) \varphi_0(z)$$

$$\text{利用公式 } \langle m|x|n\rangle = \frac{1}{a} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right]$$

可以求出 $W_{11}=W_{22}=W_{33}=0$, $W_{12}=W_{21}=W_{32}=W_{13}=W_{31}=-a$

$$\text{式中 } a = \frac{\lambda}{2a^2}; \quad a^2 = \frac{\mu\omega}{\hbar}$$

在简并子空间中，能量一级修正满足的久期方程为

$$\begin{vmatrix} -E_1^{(1)} & -a & -a \\ -a & -E_1^{(1)} & -a \\ -a & -a & -E_1^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{化成一元三次方程 } (E_1^{(1)})^3 - 3a^2 E_1^{(1)} + 2a^3 = 0$$

$$\text{将其变形为 } (E_1^{(1)} - a) \left[(E_1^{(1)})^2 + aE_1^{(1)} - 2a^2 \right] = 0$$

$$\text{解之得 } E_{11}^{(1)} = \frac{\lambda}{2a^2}; \quad E_{12}^{(1)} = \frac{\lambda}{2a^2};$$

量子力学自测题（15）参考答案

一、（20 分）氢原子在 $t=0$ 时刻处于状态

$$\psi(\hat{r}, 0) = C \left[\sqrt{\frac{1}{2}} \varphi_1(\hat{r}) + \sqrt{\frac{1}{3}} \varphi_2(\hat{r}) + \sqrt{\frac{1}{2}} \varphi_3(\hat{r}) \right]$$

式中 $\varphi_n(\hat{r})$ 为氢原子的第 n 个能量本征态。

(1) 计算归一化常数 $C=?$

(2) 计算 $t=0$ 时能量的取值概率与平均值;

(3) 写出任意时刻 t 的波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 。

解 (1) 利用归一化条件 $|C|^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{2} \right) = 1$

$$\text{可知 } C = \sqrt{\frac{3}{4}}$$

$$\text{于是归一化后的波函数为 } \psi(\vec{r}, 0) = \sqrt{\frac{3}{4}} \left[\sqrt{\frac{1}{2}} \varphi_1(\vec{r}) + \sqrt{\frac{1}{3}} \varphi_2(\vec{r}) + \sqrt{\frac{1}{2}} \varphi_3(\vec{r}) \right] =$$

$$\sqrt{\frac{3}{8}} \varphi_1(\vec{r}) + \sqrt{\frac{1}{4}} \varphi_2(\vec{r}) + \sqrt{\frac{3}{8}} \varphi_3(\vec{r})$$

(2) 氢原子的能量本征值为 $E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$

依题意知, 能量的可能取值与相应的取值概率为

$$E_1 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}; \quad W(E_1) = \frac{3}{8}$$

$$E_2 = -\frac{\mu e^4}{8\hbar^2}; \quad W(E_2) = \frac{1}{4}$$

$$E_3 = -\frac{\mu e^4}{18\hbar^2}; \quad W(E_3) = \frac{3}{8}$$

$$\text{而能量的平均值为 } \bar{E} = \sum_{n=1}^3 E_n W(E_n) = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{3}{8} - \frac{\mu e^4}{8\hbar^2} \frac{1}{4} - \frac{\mu e^4}{18\hbar^2} \frac{3}{8} = -\frac{23\mu e^4}{96\hbar^2}$$

(3) 任意时刻 t 的波函数为 $\psi(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^3 c_i(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_i t\right) \varphi_i(\vec{r}) =$

$$\sqrt{\frac{3}{8}} \varphi_1(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) + \sqrt{\frac{1}{4}} \varphi_2(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right) + \sqrt{\frac{3}{8}} \varphi_3(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_3 t\right)$$

二、(20 分) 证明:

(1) 若一个算符与角动量算符 $\hat{J}$ 的两个分量对易, 则其必与 $\hat{J}$ 的另一个分量对易;

(2) 在 $\hat{J}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的共同本征态 $|JM\rangle$ 下, $\hat{J}_x$ 与 $\hat{J}_y$ 的平均值为零, 且当 $M=J$ 时,

测量 $\hat{J}_x$ 与 $\hat{J}_y$ 的不确定性之积为最小。

证明 (1) 设算符 $\hat{F}$ 与角动量算符 $\hat{J}_x$ 及 $\hat{J}_y$ 皆对易, 即 $[\hat{F}, \hat{J}_z] = [\hat{F}, \hat{J}_y] = 0$

利用角动量算符各分量之间的对易关系 $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$

$$\text{可知 } [\hat{F}, \hat{J}_z] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, [\hat{J}_x, \hat{J}_y]] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{J}_x \hat{J}_y] - \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{J}_y \hat{J}_x] = 0$$

同理可知, 若算符 $\hat{F}$ 与角动量算符 $\hat{J}_x$ 及 $\hat{J}_z$ 皆对易, 则算符 $\hat{F}$ 必与 $\hat{J}_y$ 对易, 于是问题得证。

(2) 在 $\hat{J}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的共同本征态 $|JM\rangle$ 下, $\hat{J}_x$ 的平均值为

$$\langle JM | \hat{J}_x | JM \rangle = \frac{1}{2} \langle JM | \hat{J}_+ + \hat{J}_- | JM \rangle$$

由升降算符的性质可知 $\hat{J}_\pm |J, M\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)} |J, M\pm 1\rangle$

$$\text{于是有 } \langle JM | \hat{J}_x | JM \rangle = 0$$

同理可证, 算符 $\hat{J}_y$ 在 $|JM\rangle$ 下的平均值也为零。

在 $|JM\rangle$ 态上, 算符 $\hat{J}_x^2$ 的平均值为

$$\begin{aligned} \langle JM | \hat{J}_x^2 | JM \rangle &= \frac{1}{4} \langle JM | (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) | JM \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \langle JM | \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ | JM \rangle = \frac{1}{2} \langle JM | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | JM \rangle = \\ &= \frac{1}{2} [J(J+1) - M^2] \hbar^2 \end{aligned}$$

$$\text{同理可得 } \langle JM | \hat{J}_y^2 | JM \rangle = \frac{1}{2} [J(J+1) - M^2] \hbar^2$$

$$\text{由不确定关系可知 } (\Delta J_x)^2 \cdot (\Delta J_y)^2 = \frac{1}{4} [J(J+1) - M^2] \hbar^2$$

$$\text{或者写为 } \Delta J_x \cdot \Delta J_y = \frac{1}{2} [J(J+1) - M^2] \hbar$$

$$\text{显然, 当 } M=J \text{ 时, 上式取最小值, 即 } (\Delta J_x \cdot \Delta J_y)_{\min} = \frac{J}{2} \hbar$$

三、(20) 一个质量为 μ 的粒子, 在如下的三维势场中运

$$V(x, y, z) = \begin{cases} V_x = \begin{cases} 0 & \left(-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}\right) \\ \infty & \left(x < -\frac{a}{2}\right), \left(x > \frac{a}{2}\right) \end{cases} \\ V_y = \frac{1}{2} \mu \omega^2 y^2 \\ V_z = \begin{cases} 0 & \left(-\frac{b}{2} \leq z \leq \frac{b}{2}\right) \\ \infty & \left(z < -\frac{b}{2}\right), \left(z > \frac{b}{2}\right) \end{cases} \end{cases}$$

求粒子的能量和相应的本征函数。

解 定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

利用分离变量法，若令

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

$$E = E_x + E_y + E_z$$

则有

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} X(x) + V_x X(x) = E_x X(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dy^2} Y(y) + V_y Y(y) = E_y Y(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} Z(z) + V_z Z(z) = E_z Z(z)$$

上述三个方程的解已经求出，能量本征值是

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} m^2 + \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu b^2} n^2 =$$

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu} \left(\frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} \right) + \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

其中， $m, n=1, 2, 3, \dots$; $k=0, 1, 2, \dots$ 。

相应的各分量本征函数分别为

$$X_m(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x + \frac{m\pi}{2}\right) & (|x| \leq \frac{a}{2}) \\ 0 & (|x| > \frac{a}{2}) \end{cases}$$

$$Y_k(y) = N_k H_k(ay) \exp\left(-\frac{1}{2}a^2 y^2\right)$$

$$Z_n(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{b}z + \frac{n\pi}{2}\right) & (|z| \leq \frac{b}{2}) \\ 0 & (|z| > \frac{b}{2}) \end{cases}$$

最后，当 $|x| \leq \frac{a}{2}$ 且 $|z| \leq \frac{b}{2}$ 时，粒子的本征函数为

$$\psi_{mnk}(x, y, z) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x + \frac{m\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b}z + \frac{n\pi}{2}\right) N_k H_k(ay) \exp\left(-\frac{1}{2}a^2 y^2\right)$$

否则为零。

四、(20 分) 由两个自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的非全同粒子构成的体系，若两个粒子的自旋

$$\text{分别处于 } \chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) \end{pmatrix}$$

的态上，求体系分别处于单态与三重态的概率。

解 依题意可知，两个粒子构成的体系处于状态

$$|\psi\rangle = |+\rangle_1 \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right) |+\rangle_2 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) |-\rangle_2 \right] =$$

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right) |++\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) |+-\rangle$$

两个自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 粒子的总自旋量子数 $S=0, 1$ ，其单态为 $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle]$

故体系处于单态的概率为 $W(S=0) = |\langle 00|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} |(\langle + - | - \langle - + |) \psi\rangle|^2 =$

$$\frac{1}{2} \left| \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) \right|^2 = \frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

而三重态为 $|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle]$ ， $|11\rangle = |++\rangle$ ， $|1-1\rangle = |--\rangle$

体系处于三重态的概率为

$$W(S=1) = \sum_{M=1}^1 \left| \langle 1M | \psi \rangle \right|^2 =$$

$$\frac{1}{2} \left| \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) \right|^2 + \left| \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp\left(-\frac{i\varphi}{2}\right) \right|^2 =$$

$$\frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

两者概率之和 $\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = 1$

五、(20) 分一个质量为 μ ，角频率为 ω_0 的线谐振子，受到微扰 $\hat{W} = \beta x^2$ 的作用。

- (1) 用微扰论求能量的一级修正；
- (2) 求能量的严格解，并与 (1) 的结果比较。

解：(1) 无微扰线谐振子的哈密顿算符 $\hat{H}_0$ 满足 $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle$

$$\text{其中 } E_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0$$

$$\text{能量的一级修正为 } E_k^{(1)} = \langle k | \hat{W} | k \rangle = \beta \langle k | x^2 | k \rangle$$

$$\text{利用公式 } \langle m | x | n \rangle = \frac{1}{a} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right]$$

$$\text{可以得到 } \langle m | x^2 | n \rangle = \sum_k \langle m | x | k \rangle \langle k | x | n \rangle =$$

$$\frac{1}{2a^2} \left[\sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} + (2n+1) \delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \right]$$

能量的一级修正为

$$E_k^{(1)} = \frac{\beta}{2a^2} (2k+1) = \left(k + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar \beta}{\mu \omega_0}$$

$$\text{能量近似到一级修正的结果为 } E_k \approx \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 \left(1 + \frac{\beta}{\mu \omega_0^2}\right)$$

(2) 为了求得严格解，改写体系的哈密顿算符

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 x^2 + \beta x^2 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \left(\frac{1}{2} \mu \omega_0^2 + \beta\right) x^2$$

$$\text{若令 } \frac{1}{2} \mu \omega^2 = \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 + \beta$$

$$\text{即 } \omega = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2\beta}{\mu}} = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{2\beta}{\mu\omega_0^2}}$$

$$\text{则体系的严格解为 } E_k = \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 \sqrt{1 + \frac{2\beta}{\mu\omega_0^2}}$$

$$\text{因 } \beta \text{ 是一个小量, 故一级近似的结果为 } E_k \approx \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 \left(1 + \frac{\beta}{\mu\omega_0^2}\right)$$

上式与微扰论的一级近似完全一致。

量子力学自测题 (16) 参考答案

$$\text{一、(20 分) 线谐振子在 } t=0 \text{ 时处于 } \psi(x,0) = \frac{1}{2}\varphi_0(x) + \frac{\sqrt{3}}{2}\varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_2(x)$$

态上, 其中 $\varphi_n(x)$ 为线谐振子第 n 个能量本征值 E_n 对应的本征函数。

(1) 求在 $\psi(x,0)$ 态上能量的可测值、取值概率与平均值;

(2) 写出 $t>0$ 时刻的波函数及相应的能量取值概率与平均值。

$$\text{解: 线谐振子能量的本征值为 } E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

$$\text{利用归一化条件 } |c|^2 \left[\frac{1}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \right] = 1, \text{ 可知归一化常数为 } c = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$\text{归一化的波函数为 } \psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{6}}\varphi_0(x) + \sqrt{\frac{1}{2}}\varphi_1(x) + \sqrt{\frac{1}{3}}\varphi_2(x)$$

(1) 在 $\psi(x,0)$ 态上, 能量的可能取值及相应的取值概率为

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega; \quad W(E_0,0) = \frac{1}{6}$$

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega; \quad W(E_1,0) = \frac{1}{2}$$

$$E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega; \quad W(E_2,0) = \frac{1}{3}$$

$$\text{能量平均值为 } \bar{E} = \sum_{n=0}^2 E_n W(E_n,0) = \left(\frac{1}{2} \frac{1}{6} + \frac{3}{2} \frac{1}{2} + \frac{5}{2} \frac{1}{3} \right) \hbar \omega = \frac{5}{3} \hbar \omega$$

(2) 由于哈密顿算符不显含时间, 故有

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{6}}\varphi_0(x)\exp\left(-\frac{i}{2}\omega t\right) + \sqrt{\frac{1}{2}}\varphi_1(x)\exp\left(-\frac{3i}{2}\omega t\right) + \sqrt{\frac{1}{3}}\varphi_3(x)\exp\left(-\frac{5i}{2}\omega t\right)$$

因为哈密顿量是守恒量, 所以能量的取值概率和平均值皆与 $t=0$ 时一样。

二、(20 分) 设 $|n\rangle$ 是算符 $\hat{N} - \hat{a}_+ \hat{a}_-$ 的本征函数, 相应之本征值为 $n(n \geq 0)$, 算符

$\hat{a}_+$ 和 $\hat{a}_-$ 满足对易关系 $\hat{a}_- \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \hat{a}_- = 1$ 。证明: $\hat{a}_- |n\rangle$ 和 $\hat{a}_+ |n\rangle$ (其是 $n \geq 1$) 也是 $\hat{N}$ 的本征函数, 其相应的本征值分别为 $(n-1)$ 和 $(n+1)$ 。

解 用粒子数算符 $\hat{N}$ 作用到 $\hat{a}_- |n\rangle$ 上, 即

$$\begin{aligned}\hat{N}\hat{a}_- |n\rangle &= \hat{a}_+ \hat{a}_- \hat{a}_- |n\rangle = (\hat{a}_- \hat{a}_+ - 1)\hat{a}_- |n\rangle = \\ &\hat{a}_- \hat{a}_+ \hat{a}_- |n\rangle = (\hat{a}_- \hat{a}_- |n\rangle) = \\ &\hat{a}_- \hat{N} |n\rangle - \hat{a}_- |n\rangle = (n-1)\hat{a}_- |n\rangle\end{aligned}$$

上式表明 $\hat{a}_- |n\rangle$ 是 $\hat{N}$ 的本征态, 相应的本征值为 $(n-1)$ 。

同样, 用粒子数算符 $\hat{N}$ 作用到 $\hat{a}_+ |n\rangle$ 上, 即

$$\begin{aligned}\hat{N}\hat{a}_+ |n\rangle &= \hat{a}_+ \hat{a}_- \hat{a}_+ |n\rangle = \hat{a}_+ \hat{a}_+ \hat{a}_- |n\rangle + \hat{a}_+ |n\rangle = \\ &\hat{a}_+ \hat{N} |n\rangle + \hat{a}_+ |n\rangle = (n+1)\hat{a}_+ |n\rangle\end{aligned}$$

上式表明 $\hat{a}_+ |n\rangle$ 也是 $\hat{N}$ 的本征态, 相应的本征值为 $(n+1)$ 。

三、(20) 设做一维自由运动的粒子 $t=0$ 时处于

$$\psi(x,0) = A[\sin^2(kx) + \cos(kx)]$$

态上, 求 $t>0$ 和 $t>0$ 时粒子动量与动能的平均值。

解 由于动量算符与动能算符对易, 它们有共同本征函数

$$\varphi_k(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$$

将 $t=0$ 时的波函数写成 $\varphi_k(x)$ 的线性组合, 即

$$\begin{aligned}\psi(x,0) &= A[\sin^2(kx) + \cos(kx)] = \\ &A\left\{\left[\frac{1}{2i}(\exp(ikx) - \exp(-ikx))\right]^2 + \frac{1}{2}[\exp(ikx) + \exp(-ikx)]\right\} =\end{aligned}$$

$$\frac{A}{4} \{-\exp(i2kx) + 2 - \exp(-i2kx) + 2\exp(ikx) + 2\exp(-ikx)\} =$$

$$\frac{A}{4} \sqrt{2\pi} \{-\varphi_{2k}(x) + 2\varphi_0(x) - \varphi_{-2k}(x) + 2\varphi_k(x) + 2\varphi_{-k}(x)\}$$

归一化常数为 $A = \sqrt{\frac{4}{7\pi}}$

动量的取值概率为 $W(p = \pm 2k\hbar) = \frac{1}{14}$; $W(p = \pm k\hbar) = \frac{2}{7}$; $W(p = 0) = \frac{7}{2}$

动量的平均值为 $\bar{p} = \sum_p pW(p) = 0$

动能的平均值为 $\overline{T(0)} = \frac{1}{2m} \sum_p p^2 W(p) = \frac{4k^2 \hbar^2}{7m}$

因为动量算符和动能算符皆与哈密顿算符对易, 故它们都是守恒量, 而守恒量的取值概率与平均值皆不随时间改变, 故 $t > 0$ 时的结果与 $t = 0$ 时完全一样。

四、(20 分) 两个自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的非全同粒子, 自旋之间的相互作用是 $C\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2$,

其中 C 是实常数, $\hat{s}_1$ 与 $\hat{s}_2$ 分别是粒子 1 和粒子 2 的自旋算符。设 $t=0$ 时, 粒子 1 的自旋沿 z 轴的正方向, 粒子 2 的自旋沿 z 轴的负方向, 求 $t > 0$ 时测量粒子 2 的自旋处于 z 轴负方向的概率。

解 体系的哈密顿算符为 $\hat{H} = C\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 = \frac{C}{2}(\hat{s}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2)$

选择耦合表象, 由于 $S=0, 1$, 故四个基底分别为

$$|1\rangle = |11\rangle; |2\rangle = |1-1\rangle; |0\rangle = |10\rangle; |4\rangle = |00\rangle$$

在此基底之下, 哈密顿算符是对角矩阵, 即

$$\hat{H} = \frac{C}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

可以直接写出它的解为

$$E_1 = \frac{C}{4} \hbar^2; |\psi_1\rangle = |11\rangle = |++\rangle$$

$$E_2 = \frac{C}{4} \hbar^2; |\psi_2\rangle = |1-1\rangle = |--\rangle$$

$$E_3 = \frac{C}{4} \hbar^2; |\psi_3\rangle = |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[+-\rangle + -+\rangle]$$

$$E_4 = 1 - \frac{3C}{4} \hbar^2; |\psi_4\rangle = |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[+-\rangle - -+\rangle]$$

已知 $t=0$ 时, 体系处于 $|\psi(0)\rangle = |+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|10\rangle + |00\rangle]$

因为哈密顿算符不显含时间, 故 $t>0$ 时刻的波函数为

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_3 t\right) |10\rangle + \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_4 t\right) |00\rangle \right] =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle] \exp\left(-\frac{i}{4} C \hbar t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] \exp\left(\frac{3i}{4} C \hbar t\right)$$

粒子 2 处于 z 轴负方向的概率为

$$W\left(s_{2z} = -\frac{\hbar}{2}, t\right) = \left| \langle - | \psi(t) \rangle \right|^2 =$$

$$\left| \frac{1}{2} \left[\exp\left(-\frac{i}{4} C \hbar t\right) + \exp\left(\frac{3i}{4} C \hbar t\right) \right] \right|^2 =$$

$$\left| \frac{1}{2} \left[\exp\left(-\frac{i}{4} C \hbar t\right) \exp\left(-\frac{i}{4} C \hbar t\right) + \exp\left(\frac{3i}{4} C \hbar t\right) \right] \right|^2 =$$

$$\left| \frac{1}{2} \left[\exp\left(-\frac{i}{2} C \hbar t\right) + \exp\left(\frac{i}{2} C \hbar t\right) \right] \right|^2 = \cos^2\left(\frac{C \hbar}{2} t\right)$$

五、(20 分) 三维各向同性谐振子的哈密顿算符为 $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$

试写出能量本征值与本征函数。如这谐振子又受到微扰 $\hat{W} = \frac{\lambda}{2} m \omega^2 xy$ ($\lambda \ll 1$) 的作用, 求基态能量到二阶修正, 并与精确解比较。

解 已知 $\hat{H}_0$ 的本征解为 $E_n^0 = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}^0(x, y, z) = \varphi_{n_x}(x) \varphi_{n_y}(y) \varphi_{n_z}(z) \quad (n, n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots)$$

对于基态而言, 由于 $n_x = n_y = n_z = 0$, 故可以直接使用无简并微扰论公式进行讲

算

$$E_0^{(0)} = E_0^0 = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_{000}^0 | \hat{W} | \psi_{000}^0 \rangle = \frac{\lambda}{2} m \omega^2 \langle \psi_{000}^0 | xy | \psi_{000}^0 \rangle$$

利用公式
$$\langle m | x | n \rangle = \frac{1}{a} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m, n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m, n+1} \right]$$

可知
$$\langle \psi_{000}^0 | xy | \psi_{000}^0 \rangle = \langle \varphi_0(x) | x | \varphi_0(x) \rangle \langle \varphi_0(y) | y | \varphi_0(y) \rangle = 0$$

于是有 $E_0^{(1)} = 0$

能量的二级修正为

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \sum_{i=1}^{f_n} \frac{\left| \langle \psi_{000}^0 | \hat{W} | \psi_{ni}^0 \rangle \right|^2}{E_0^0 - E_n^0} = \frac{\left| \langle \psi_{000}^0 | \hat{W} | \psi_{110}^0 \rangle \right|^2}{E_0^0 - E_2^0} =$$

$$-\frac{\lambda^2 m^2 \omega^4}{8\hbar\omega} \langle \varphi_0(x) | x | \varphi_1(x) \rangle \langle \varphi_0(y) | y | \varphi_1(y) \rangle^2$$

$$-\frac{\lambda^2}{32} \hbar\omega$$

近似解为 $E_0 \approx \frac{3}{2} \hbar\omega - \frac{\lambda^2}{32} \hbar\omega$

下面利用坐标变换求体系的精确解。由于微扰项与 z 方向无关，故可以只考虑另外两个方向的坐标变换。令 $x = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + Y)$ ； $y = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - Y)$

即 $X = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + y)$ ； $Y = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - y)$

$$x^2 + y^2 = X^2 + Y^2$$

$$xy = \frac{1}{2}(X^2 - Y^2)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2}$$

因此哈密顿算符可以改写为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 (X^2 + Y^2 + Z^2) + \frac{\lambda}{4} m \omega^2 (X^2 - Y^2)$$

若令 $\omega_1^2 = \left(1 + \frac{\lambda}{2}\right) \omega^2$ ； $\omega_2^2 = \left(1 - \frac{\lambda}{2}\right) \omega^2$

则哈密顿算符为 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega_1^2 X^2 + \frac{1}{2} m \omega_2^2 Y^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 Z^2$

最后得到精确解为 $E_{n_1, n_2, n_3} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_2 + \left(n_3 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$

$$\text{基态能量为 } E_0 = \frac{1}{2} \hbar(\omega_1 + \omega_2 + \omega) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{\lambda}{2}} + \sqrt{1 - \frac{\lambda}{2}} + 1 \right) \hbar\omega$$

$$\text{由于 } \lambda \ll 1, \text{ 故可以利用公式 } \sqrt{1+x} = 1 \pm \frac{1}{2}x - \frac{1 \times 1}{2 \times 4}x^2 \pm \frac{1 \times 1 \times 3}{2 \times 4 \times 6}x^3 - \dots$$

$$\text{将根式展开至 } \lambda \text{ 的二次项, 得到 } E_0 \approx \frac{3}{2} \hbar\omega - \frac{\lambda^2}{32} \hbar\omega$$

与微扰论的二级近似结果完全一致。

量子力学自测题 (17) 参考答案

- 一、1、描写自由粒子的平面波称为德布罗意波；其表达式： $\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}$
 2、定态：定态是能量取确定值的状态。性质：定态之下不显含时间的力学量的取值几率和平均值不随时间改变。
 3、全同费米子的波函数是反对称波函数。两个费米子组成的全同粒子体系的波

$$\text{函数为: } \phi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_2) - \varphi_1(q_2)\varphi_2(q_1)]$$

- 4、 $i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2) = i[\hat{p}_x^2, x] = i\hat{p}_x[\hat{p}_x, x] + i[\hat{p}_x, x]\hat{p}_x = 2\hbar\hat{p}_x$, 因为 $\hat{p}_x$ 是厄密算符, 所以 $i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2)$ 是厄密算符。

- 5、设 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的对易关系 $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = i\hat{k}$, k 是一个算符或普通的数。以 $\bar{F}$ 、 $\bar{G}$ 和 $\bar{k}$ 依次表示 $\hat{F}$ 、 $\hat{G}$ 和 k 在态 ψ 中的平均值, 令 $\Delta\hat{F} = \hat{F} - \bar{F}$, $\Delta\hat{G} = \hat{G} - \bar{G}$,

$$\text{则有 } \overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{\bar{k}^2}{4}, \text{ 这个关系式称为测不准关系。}$$

$$\text{坐标 } x \text{ 和动量 } \hat{p}_x \text{ 之间的测不准关系为: } \Delta x \cdot \Delta \hat{p}_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

- 二、解 1、由于 $\hat{A}^2 = 1$, 所以算符 $\hat{A}$ 的本征值是 ± 1 , 因为在 A 表象中, 算符 $\hat{A}$

$$\text{的矩阵是对角矩阵, 所以, 在 A 表象中算符 } \hat{A} \text{ 的矩阵是: } \hat{A}(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{设在 A 表象中算符 } \hat{B} \text{ 的矩阵是 } \hat{B}(A) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}, \text{ 利用 } \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0 \text{ 得:}$$

$$b_{11} = b_{22} = 0; \text{ 由于 } \hat{B}^2 = 1, \text{ 所以 } \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{12}b_{21} & 0 \\ 0 & b_{21}b_{12} \end{pmatrix} = 1,$$

$$\therefore b_{12} = \frac{1}{b_{21}}; \text{ 由于 } \hat{B} \text{ 是厄密算符, } \hat{B}^+ = \hat{B}, \therefore \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ \frac{1}{b_{12}} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{b_{12}^*} \\ b_{12}^* & 0 \end{pmatrix} \therefore b_{12} = \frac{1}{b_{12}^*}$$

令 $b_{12} = e^{i\delta}$ ，其中 δ 为任意实常数，得 $\hat{B}$ 在 A 表象中的矩阵表示式为：

$$\hat{B}(A) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}$$

2、类似地，可求出在 B 表象中算符 $\hat{A}$ 的矩阵表示为：

$$\hat{A}(B) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}$$

在 B 表象中算符 $\hat{A}$ 的本征方程为：

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad \text{即} \quad \begin{pmatrix} e^{i\delta} \beta \\ e^{-i\delta} \alpha \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow \begin{cases} -\lambda\alpha + e^{i\delta}\beta = 0 \\ e^{-i\delta}\alpha - \lambda\beta = 0 \end{cases}$ α 和 β 不同时为零的条件是上述方程的系数行列式为

零，即 $\begin{vmatrix} -\lambda & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0 \quad \therefore \lambda = \pm 1$

对 $\lambda = 1$ 有： $\varphi_A^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix}$ ，对 $\lambda = -1$ 有： $\varphi_A^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$

所以，在 B 表象中算符 $\hat{A}$ 的本征值是 ± 1 ，本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix}$ 和 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$

3、类似地，在 A 表象中算符 $\hat{B}$ 的本征值是 ± 1 ，本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ 1 \end{pmatrix}$ 和 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} \\ -1 \end{pmatrix}$

从 A 表象到 B 表象的么正变换矩阵就是将算符 $\hat{B}$ 在 A 表象中的本征函数按列排成

的矩阵，即 $S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta} & e^{-i\delta} \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

$$E_n = -\frac{e_s^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (n=1,2,3\cdots)$$

三、解：已知氢原子的本征解为：

$\phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ，将 $\psi(r, 0)$ 向氢原子的本征态展开，

1、 $\psi(r, 0) = \sum_{nlm} c_{nlm}(0)\phi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ ，不为零的展开系数只有三个，即

$$c_{210}(0) = \frac{1}{2}, \quad c_{310}(0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{21-1}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \text{显然，题中所给的状态并未归一}$$

化，容易求出归一化常数为： $\sqrt{\frac{4}{5}}$ ，于是归一化的展开系数为：

$$c_{210}(0) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4}{5}} = \sqrt{\frac{1}{5}}, \quad c_{310}(0) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{4}{5}} = -\sqrt{\frac{2}{5}}, \quad c_{21-1}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{4}{5}} = \sqrt{\frac{2}{5}}$$

(1) 能量的取值几率 $W(E_2, 0) = \frac{1}{5} + \frac{2}{5} = \frac{3}{5}, \quad W(E_3, 0) = \frac{2}{5},$

平均值为： $\bar{E} = \frac{3}{5}E_2 + \frac{2}{5}E_3$

(2) $\hat{L}^2$ 取值几率只有: $W(2\hbar^2, 0) = 1$, 平均值 $\overline{\hat{L}^2} = 2\hbar^2$

(3) $\hat{L}_z$ 的取值几率为: $W(0\hbar, 0) = \frac{1}{5} + \frac{2}{5} = \frac{3}{5}$, $W(-\hbar, 0) = \frac{2}{5}$, 平均值 $\overline{\hat{L}_z} = -\frac{2}{5}\hbar$

$$\begin{aligned} 2、t > 0 \text{ 时体系的波函数为: } \psi(r, t) &= \sum_{nlm} c_{nlm}(0) \phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \\ &= [c_{210}(0) \phi_{210}(r, \theta, \varphi) + c_{21-1}(0) \phi_{21-1}(r, \theta, \varphi)] \exp(-\frac{i}{\hbar} E_2 t) + c_{310}(0) \phi_{310}(r, \theta, \varphi) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_3 t) \\ &= [\sqrt{\frac{1}{5}} \phi_{210}(r, \theta, \varphi) + \sqrt{\frac{2}{5}} \phi_{21-1}(r, \theta, \varphi)] \exp(-\frac{i}{\hbar} E_2 t) - \sqrt{\frac{2}{5}} \phi_{310}(r, \theta, \varphi) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_3 t) \end{aligned}$$

由于 E 、 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 皆为守恒量, 所以它们的取值几率和平均值均不随时间改变, 与 $t=0$ 时的结果是一样的。

四、解: (1) $\hat{H}$ 的本征值是方程 $\det(\hat{H} - \lambda I) = 0$ 的根

$$0 = \begin{vmatrix} 1-\lambda & C & 0 \\ C & 3-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & C-2-\lambda \end{vmatrix} = (C-2-\lambda)(\lambda^2 - 4\lambda + 3 - C^2)$$

结果: $\lambda = C-2$, $\lambda = 2 \pm \sqrt{1+C^2}$, 这是 $\hat{H}$ 的精确解。

(2) 根据题意, 体系能级的二级修正可写为: $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$

由题设可知: 能量的一级修正为: $H'_{11} = 0$, $H'_{22} = 0$, $H'_{33} = C$

$$\text{对于二级修正, 有: } E_1^{(2)} = \frac{H'_{12}H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{H'_{13}H'_{31}}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{1-3} + \frac{0}{1-(-2)} = -\frac{C^2}{2}$$

$$E_2^{(2)} = \frac{H'_{21}H'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H'_{23}H'_{32}}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{3-1} + \frac{0}{3-(-2)} = \frac{C^2}{2}$$

$$E_3^{(2)} = \frac{H'_{31}H'_{13}}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H'_{32}H'_{23}}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = 0 \quad \text{所以, } E_1 = 1 - \frac{C^2}{2}, \quad E_2 = 3 + \frac{C^2}{2}, \quad E_3 = -2 + C$$

$$\text{将 } \lambda = 2 \pm \sqrt{1+C^2} \text{ 展开: } \lambda = 2 \pm \sqrt{1+C^2} = 2 \pm (1 + \frac{1}{2}C^2 + \dots)$$

$$\Rightarrow \lambda_1 = 3 + \frac{1}{2}C^2, \quad \lambda_2 = 1 - \frac{1}{2}C^2, \quad (C^2 \ll 1) \quad (3) \text{ 对比可知, 根据微扰}$$

公式求得的能量二级修正值, 与精确求解的结果是吻合的。

$$\text{五、解: } S_+ \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| +\frac{1}{2} \right\rangle + iS_y \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + i \left(\frac{i\hbar}{2} \right) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = 0,$$

$$S_+ \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + iS_y \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| +\frac{1}{2} \right\rangle + i \left(\frac{-i\hbar}{2} \right) \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| +\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$S_- \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| +\frac{1}{2} \right\rangle - iS_y \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle - i \left(\frac{i\hbar}{2} \right) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$S_- \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = S_x \left| -\frac{1}{2} \right\rangle - iS_y \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| +\frac{1}{2} \right\rangle - i \left(\frac{-i\hbar}{2} \right) \left| +\frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

所以 S_+ 和 S_- 分别作用于 S_z 的本征态 $\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 的结果是

$$S_+ \left|+\frac{1}{2}\right\rangle = 0, \quad S_+ \left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar \left|+\frac{1}{2}\right\rangle, \quad S_- \left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar \left|-\frac{1}{2}\right\rangle, \quad S_- \left|-\frac{1}{2}\right\rangle = 0$$

结果表明：称 S_+ 为自旋升算符是合理的，因为它将 z 方向的自旋从 $-\hbar/2$ 增加到 $\hbar/2$ 。同样，称 S_- 为自旋降算符，因为它将 z 方向的自旋从 $\hbar/2$ 降到 $-\hbar/2$ 。 S_+ 和 S_- 容许我们从 S_z 的一个本征态跳跃到另一个本征态，它们在自旋的计算中是非常有用的。

量子力学自测题（18）参考答案

一. (10 分)

5 分 a. $s_x s_z s_x s_y s_x = -s_z s_x^2 s_y s_x = -\frac{\hbar^2}{4} s_z s_y s_x = i\left(\frac{\hbar}{2}\right)^5$

或 $= -\frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{2} (s_y s_z - s_z s_y) s_x = i\left(\frac{\hbar}{2}\right)^5$

5 分

b. $\underline{s} \times \underline{s} = \vec{i}(s_y s_z - s_z s_y) + \vec{j}(s_z s_x - s_x s_z) + \vec{k}(s_x s_y - s_y s_x) = i\hbar \underline{s}$

二. (12 分) $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \quad \therefore |\alpha'\rangle = |\alpha\rangle$

4 分 $|\beta'\rangle = N(|\beta\rangle - |\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle) = N(|\beta\rangle - 0.3|\alpha\rangle)$

由 $\langle\beta'|\beta'\rangle = 1 = N^2(\langle\beta| - 0.3\langle\alpha|)(|\beta\rangle - 0.3|\alpha\rangle) = N^2(1 - 0.3^2 \cdot 2 + 0.3^2)$

2 分 $N = \frac{1}{\sqrt{0.91}}, \quad |\beta'\rangle = \frac{1}{\sqrt{0.91}}(|\beta\rangle - 0.3|\alpha\rangle)$

4 分 $|\gamma'\rangle = N(|\gamma\rangle - 0.2|\alpha\rangle) - |\beta'\rangle\langle\beta'|\gamma\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\gamma'|\gamma'\rangle = 1 = N^2(\langle\gamma|\gamma\rangle - 0.2\langle\gamma|\alpha\rangle - \langle\beta'|\gamma\rangle\langle\gamma|\beta'\rangle - 0.2\langle\alpha|\gamma\rangle + 0.2 \cdot 0.2 \\ - \langle\beta'|\gamma\rangle\langle\gamma|\beta'\rangle + \langle\beta'|\gamma\rangle\langle\gamma|\beta'\rangle) \end{aligned}$$

$$\langle\beta'|\gamma\rangle = \frac{1}{\sqrt{0.91}}(\langle\beta|\gamma\rangle - 0.3\langle\alpha|\gamma\rangle) = \frac{0.74}{\sqrt{0.91}}$$

$$N^2 \cdot (1 - 0.2^2 - \frac{0.74^2}{0.91} - 0.2^2 + 0.2^2) = N^2 \frac{0.326}{0.91} = 1,$$

2 分

$$N = 1.67$$

三. (16 分) $\hat{s}_z |m\rangle = m \frac{\hbar}{2} |m\rangle$

$$\hat{s}_n |m\rangle' = e^{-i\hat{s}_z\varphi/\hbar} e^{-i\hat{s}_y\theta/\hbar} \hat{s}_z e^{i\hat{s}_y\theta/\hbar} e^{i\hat{s}_z\varphi/\hbar} |m\rangle'$$

如 $|m\rangle' = e^{-i\hat{s}_z\varphi/\hbar} e^{-i\hat{s}_y\theta/\hbar} |m\rangle$, 则 $\hat{s}_n |m\rangle' = \frac{\hbar}{2} m |m\rangle'$

6 分 $\therefore$ 它的本征值为 $\pm \frac{\hbar}{2}$

相应的本征值在 $\hat{s}_z$ 表象中的表示

$$\langle m' | m \rangle' = \langle m' | (\cos \frac{\varphi}{2} - i\sigma_z \sin \frac{\varphi}{2}) (\cos \frac{\theta}{2} - i\sigma_y \sin \frac{\theta}{2}) | m \rangle$$

$$\langle m' | (\cos \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\theta}{2} - i\sigma_y \cos \frac{\varphi}{2} \sin \frac{\theta}{2} - i\sigma_x \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\theta}{2} + i\sigma_x \sin \frac{\varphi}{2} \sin \frac{\theta}{2}) | m \rangle$$

$$= \langle m' | \cos \frac{\theta}{2} (\cos \frac{\varphi}{2} - i\sigma_z \sin \frac{\varphi}{2}) + \sin \frac{\theta}{2} (\sigma_- e^{i\varphi/2} - \sigma_+ e^{-i\varphi/2}) | m \rangle$$

6 分 $= \cos \frac{\theta}{2} e^{\mp i\varphi/2} \Big|_{m'=m=\pm 1} + \sin \frac{\theta}{2} (\pm) e^{\pm i\varphi/2} \delta \Big|_{\substack{m=1, m'=-1 \\ m=-1, m'=1}}$

2 分 $\hat{s}_n$ 本征值为 $\hbar/2$, 本征表示为 $\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$

2 分 $-\hbar/2$, 本征表示为 $\begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$

四. (18 分)

$$\begin{aligned}
 6 \text{ 分 } a. \quad \varphi_{p_x} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-2\pi/b}^{2\pi/b} e^{-ip_x x/\hbar} \sqrt{\frac{b}{2\pi}} \frac{e^{ibx} - e^{-ibx}}{2i} dx \\
 &= \left(\frac{b}{\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{4i\pi} \int [e^{i(bx-p_x x)/\hbar} - e^{-i(bx+p_x x)/\hbar}] dx \\
 &= \frac{1}{4\pi i} \frac{b}{\hbar} \left[\frac{1}{i(b-p_x/\hbar)} e^{i(b-p_x/\hbar)x} \right]_{-2\pi/b}^{2\pi/b} + \frac{1}{i(b+p_x/\hbar)} e^{-i(b+p_x/\hbar)x} \left[\right]_{-2\pi/b}^{2\pi/b} \\
 &= \frac{1}{4\pi} (\hbar b)^{1/2} (+2i) \sin \frac{2\pi p_x}{\hbar b} \frac{2\hbar b}{(\hbar b)^2 - p_x^2}
 \end{aligned}$$

该态中粒子动量可能测得值为 $-\infty < p_x < \infty$

$$\begin{aligned}
 5 \text{ 分 } b. \quad \frac{d|\varphi(p_x)|^2}{dp_x} &= 0 = \frac{d}{dp_x} \left\{ \sin^2 \frac{2\pi p_x}{\hbar b} \frac{1}{[(\hbar b)^2 - p_x^2]^2} \right\} \\
 \therefore \quad \frac{4\pi}{\hbar b} \cos \frac{2\pi p_x}{\hbar b} + \sin \frac{2\pi p_x}{\hbar b} \frac{4p_x}{(\hbar b)^2 - p_x^2} &= 0 \\
 [(\hbar b)^2 - p_x^2] \cos \frac{2\pi p_x}{\hbar b} + \frac{p_x \hbar b}{\pi} \sin \frac{2\pi p_x}{\hbar b} &= 0 \\
 \therefore \text{ 有解 } p_x &= \pm \hbar b
 \end{aligned}$$

$$3 \text{ 分 } c. \quad \varphi(p_x)|_{\hbar b} = \frac{i}{\pi} (\hbar b)^{3/2} \frac{\frac{2\pi}{\hbar b} \cos \frac{2\pi p_x}{\hbar b}}{-2p_x} \bigg|_{\hbar b}$$

发现粒子在 $\hbar b - \hbar b + dp_x$ 区间中的几率为

$$\begin{aligned}
 |\varphi(\hbar b)|^2 dp_x &= \frac{1}{\hbar b} dp_x \\
 4 \text{ 分 } d. \quad \psi(x, t) &= \int \varphi(p_x) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ip_x x/\hbar - i \frac{p_x^2}{2m} t/\hbar} dp_x
 \end{aligned}$$

五. (18 分)

$$a. \quad 2 \text{ 分} \quad \varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega,$$

3 分 $E_{\text{基}} = \frac{5}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \frac{7}{2}\hbar\omega$

基态 $\mathbf{n}_0 = 2, \quad \mathbf{n}_1 = 1$

2 分
$$\Psi_{01} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \mathbf{u}_0(1)\alpha(1) & \mathbf{u}_0(2)\alpha(2) & \mathbf{u}_0(3)\alpha(3) \\ \mathbf{u}_0(1)\beta(1) & \mathbf{u}_0(2)\beta(2) & \mathbf{u}_0(3)\beta(3) \\ \mathbf{u}_1(1)\beta(1) & \mathbf{u}_1(2)\beta(2) & \mathbf{u}_1(3)\beta(3) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} [\mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(2)\chi_{00}(12)\mathbf{u}_1(3)\alpha(3) - \mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(13)\mathbf{u}_1(2)\alpha(2)$$

$$+ \mathbf{u}_0(2)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(23)\mathbf{u}_1(1)\alpha(1)]$$

1 分
$$\Psi_{02} = \frac{1}{\sqrt{3}} [\mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(2)\chi_{00}(12)\mathbf{u}_1(3)\beta(3)$$

$$- \mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(13)\mathbf{u}_1(2)\beta(2)$$

$$+ \mathbf{u}_0(2)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(23)\mathbf{u}_1(1)\beta(1)]$$

第一激发态 $\mathbf{n}_0 = 2, \quad \mathbf{n}_2 = 1$

2 分
$$\Psi_{11} = \frac{1}{\sqrt{3}} [\mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(2)\chi_{00}(12)\mathbf{u}_2(3)\alpha(3)$$

$$- \mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(13)\mathbf{u}_2(2)\alpha(2)$$

$$+ \mathbf{u}_0(2)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(23)\mathbf{u}_2(1)\alpha(1)]$$

1 分
$$\Psi_{12} = \frac{1}{\sqrt{3}} [\mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(2)\chi_{00}(12)\mathbf{u}_2(3)\beta(3)$$

$$- \mathbf{u}_0(1)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(13)\mathbf{u}_2(2)\beta(2)$$

$$+ \mathbf{u}_0(2)\mathbf{u}_0(3)\chi_{00}(23)\mathbf{u}_2(1)\beta(1)]$$

2 分
$$\Psi_{13} = \frac{1}{\sqrt{3}} [\mathbf{u}_1(1)\mathbf{u}_1(2)\chi_{00}(12)\mathbf{u}_0(3)\alpha(3)$$

$$- \mathbf{u}_1(1)\mathbf{u}_1(3)\chi_{00}(13)\mathbf{u}_0(2)\alpha(2)$$

$$+ \mathbf{u}_1(2)\mathbf{u}_1(3)\chi_{00}(23)\mathbf{u}_0(1)\alpha(1)]$$

$$\begin{aligned}
 1 \text{ 分} \quad \psi_{14} = & \frac{1}{\sqrt{3}} [u_1(1)u_1(2)\chi_{00}(12)u_0(3)\beta(3) \\
 & - u_1(1)u_1(3)\chi_{00}(13)u_0(2)\beta(2) \\
 & + u_1(2)u_1(3)\chi_{00}(23)u_0(1)\beta(1)]
 \end{aligned}$$

b. 4分 基态二重简并
第一激发态四重简并

六. (16分)

$$3 \text{ 分} \quad \text{粒子的能量为 } \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

第一激发态为

1	1	2
1	2	1
2	1	1

$$E_1^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (1+1+4) = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{\pi a^2},$$

$$5 \text{ 分} \quad \langle \vec{r} | 1 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin \frac{\pi}{a} x \sin \frac{\pi}{a} y \sin \frac{2\pi}{a} z$$

$$\langle \vec{r} | 2 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin \frac{\pi}{a} x \sin \frac{2\pi}{a} y \sin \frac{\pi}{a} z$$

$$\langle \vec{r} | 3 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin \frac{2\pi}{a} x \sin \frac{\pi}{a} y \sin \frac{\pi}{a} z$$

$$\langle 1 | \hat{H}' | 1 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^2 \int_0^a x \sin^2 \frac{\pi}{a} x dx \cdot \int_0^a y \sin^2 \frac{\pi}{a} y dy$$

$$\int_0^a x \sin^2 \frac{\pi}{a} x dx = \frac{a^2}{4}$$

$$\therefore \langle 1 | \hat{H}' | 1 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^2 \cdot \frac{a^2}{4} \cdot \frac{a^2}{4} \cdot b = \frac{1}{4} ba^2$$

$$\langle 1 | \hat{H}' | 2 \rangle = \langle 1 | \hat{H}' | 3 \rangle = 0$$

$$\langle 2 | \hat{H}' | 2 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^2 b \int_0^a x \sin^2 \frac{\pi}{a} x dx \cdot \int_0^a y \sin^2 \frac{2\pi}{a} y dy = \frac{1}{4} ba^2$$

$$\langle 2 | H' | 3 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^2 b \int_0^a x \sin \frac{\pi}{a} x \sin \frac{2\pi}{a} x dx \cdot \int_0^a y \sin \frac{2\pi}{a} y \sin \frac{\pi}{a} y dy$$

$$= \left(\frac{2}{a}\right)^2 b \left(-\frac{8a^2}{9\pi^2}\right) \left(-\frac{8a^2}{9\pi^2}\right) = \frac{4ba^2 \cdot 64}{81\pi^4}$$

$$\langle 3 | H' | 3 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^2 b \int_0^a x \sin^2 \frac{2\pi}{a} x dx \cdot \int_0^a y \sin^2 \frac{\pi}{a} y dy = \frac{1}{4} ba^2$$

4 分 于是有：

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{4}ba^2 - E^1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4}ba^2 - E^1 & \frac{64 \cdot 4ba^2}{81\pi^4} \\ 0 & \frac{64 \cdot 4ba^2}{81\pi^4} & \frac{1}{4}ba^2 - E^1 \end{vmatrix} = 0$$

2 分 $\therefore E_1^1 = \frac{1}{4}ba^2$

2 分 $E_{2,3}^1 = \frac{1}{4}ba^2 \pm \frac{64 \cdot 4ba^2}{81\pi^4} = \left(\frac{1}{4} \pm \frac{64 \cdot 4}{81\pi^4}\right)ba^2 = \left[\frac{1}{4} \pm \left(\frac{4}{3\pi}\right)^4\right]ba^2$

量子力学自测题 (19) 参考答案

I. (35 分)

A. $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} + e\hat{A}) + \frac{e}{m}\hat{S} \cdot \underline{B} - e\varphi$ (4 分)

- B. 碱金属原子能级偶数分裂 (1 分)
 光谱线偶数条 (1 分)
 分裂能级间距与能级有关 (1 分)
 由于电子具有自旋 (1 分)

C. $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \hat{H}_0\varphi_k = E_k^0\varphi_k$ (2 分)

分)

$$E_k^{(1)} = \langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle, E_k^{(2)} = \sum_{s \neq k} \frac{|\langle \varphi_s | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle|^2}{E_k^0 - E_s^0} \quad (2 \text{ 分})$$

D. $\sigma_+^2 = (\sigma_x + i\sigma_y)(\sigma_x + i\sigma_y) = \sigma_x^2 - \sigma_y^2 + i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 0$ (2 分)

$$\sigma_z^2 = (\sigma_x - i\sigma_y)(\sigma_x + i\sigma_y) = \sigma_x^2 - \sigma_y^2 - i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 0 \quad (2 \text{ 分})$$

E.

$$\rho(x, t) = |\varphi(x, t)|^2$$

(2 分)

$$j(x, t) = \frac{-i\hbar}{2m} [\varphi^*(x, t) \frac{d}{dx} \varphi(x, t) - \varphi(x, t) \frac{d}{dx} \varphi^*(x, t)] \quad (2 \text{ 分})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \rho^*(x, t) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \varphi \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\varphi^* \frac{p_x^2}{2m} \varphi + V \varphi^* \varphi) - \frac{1}{i\hbar} (\varphi \frac{p_x^2}{2m} \varphi^* + V \varphi \varphi^*) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} (\varphi^* \frac{d}{dx} \varphi - \varphi \frac{d}{dx} \varphi^*) \quad \text{因 } V = V^* \\ &= -\frac{\partial j(x, t)}{\partial x} \end{aligned} \quad (2 \text{ 分})$$

分)

F. a) 基态 $n_1 = n_2 = 0$ $\hbar\omega$ 非简并 (1 分)

分)

第一 $\begin{cases} n_1 = 0, & n_2 = 1 \\ n_1 = 1, & n_2 = 0 \end{cases}$ $2\hbar\omega$ 二重 (1 分)

第二 $\begin{cases} n_1 = 0, & n_2 = 2 \\ n_1 = 2, & n_2 = 0 \\ n_1 = 1, & n_2 = 1 \end{cases}$ $3\hbar\omega$ 三重 (2 分)

b) 基态 $n_1 = n_2 = 0$ χ_{00} (总周旋为 0) $\hbar\omega$ 非简并 (1 分)

第一 $\begin{cases} n_1 = 0, & n_2 = 1 \\ n_1 = 1, & n_2 = 0 \end{cases}$ χ_{00} (二态相加) χ_{1m} (二态相减) $2\hbar\omega$ 四重 (2 分)

第二 $\begin{cases} n_1 = 0, & n_2 = 2 \\ n_1 = 2, & n_2 = 0 \\ n_1 = 1, & n_2 = 1 \end{cases}$ χ_{00} (相加) χ_{1m} (相减) χ_{00} $3\hbar\omega$ 五重 (2 分)

c. 基态 $n_1 = n_2 = 0$ $\hbar\omega$ 非简并 (1 分)

分)

第一 $\begin{cases} n_1 = 0, & n_2 = 1 \\ n_1 = 1, & n_2 = 0 \end{cases}$ (二态相加) 非简并 (1 分)

第二 $\begin{cases} n_1 = 0, & n_2 = 2 \\ n_1 = 2, & n_2 = 0 \\ n_1 = 1, & n_2 = 1 \end{cases}$ (二态相加) 二态简并 (2 分)

II. (14 分)

归一化 $A^2 \left(\int_{-\infty}^0 e^{2x/a} dx + \int_0^{\infty} e^{-2x/a} dx \right) = A^2 a = 1, \quad A = \frac{1}{\sqrt{a}}$ (2 分)

$$\begin{aligned} E_{(a)} &= \frac{-\hbar^2}{2am} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{|x|}{a}} \frac{d}{dx} \left[\left(-\frac{1}{a}\right) \frac{|x|}{x} e^{-\frac{|x|}{a}} \right] dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 e^{-\frac{2|x|}{a}} dx \\ &= \frac{-\hbar^2}{2am} \left(-\frac{1}{a}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{|x|}{a}} (2\delta_{(x)} e^{-\frac{|x|}{a}} - \frac{1}{a} e^{-\frac{|x|}{a}}) dx + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{2} a^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^2 m} \left(2 - \frac{1}{a} \cdot a\right) + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{2} a^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^2 m} + \frac{1}{4} m \omega^2 a^2 \end{aligned}$$

(6 分) (动能计算错扣 3 分)

另一种求法 $E_{(a)} = \frac{1}{2am} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{|x|}{a}} \hat{p}_x^2 e^{-\frac{|x|}{a}} dx + \frac{1}{4} m \omega^2 a^2$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2am} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{-1}{a} \frac{|x|}{x} e^{\frac{2|x|}{a}}\right)^* \left(-i\hbar \frac{-1}{a} \frac{|x|}{x} e^{-\frac{|x|}{a}}\right) dx + \frac{1}{4} m \omega^2 a^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^3 m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2|x|}{a}} dx + \frac{1}{4} m \omega^2 a^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^2 m} + \frac{1}{4} m \omega^2 a^2 \end{aligned}$$

$$E'_{(a)} = \frac{-\hbar^2}{a^3 m} + \frac{1}{2} m \omega^2 a = 0, \quad a^4 = \frac{2\hbar^2}{m^2 \omega^2} \quad (3 \text{ 分})$$

$$E_{\min} = \frac{\hbar}{2m} \sqrt{\frac{m^2 \omega^2}{2\hbar^2}} + \frac{1}{4} m \omega^2 \sqrt{\frac{2\hbar^2}{m^2 \omega^2}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \hbar \omega \quad (3 \text{ 分})$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-\frac{|x|}{a}}, \quad a^2 = \sqrt{2} \frac{\hbar}{m\omega}$$

(结果错扣3分)

III. (16分)

$$A. \begin{vmatrix} E_0 & \Delta E \\ \Delta E & E_0 - E \end{vmatrix} = 0, \quad \therefore E_{\pm} = E_0 \pm \Delta E$$

$$E_+ = E_0 + \Delta E, \quad u_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

$$E_- = E_0 - \Delta E, \quad u_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

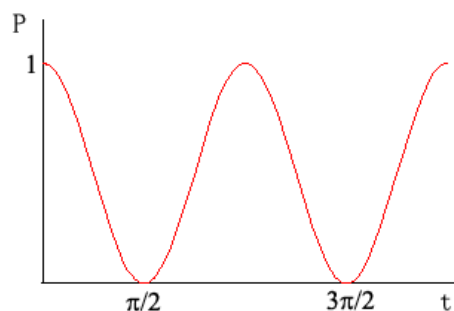
$$B. \psi_{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = a_+ u_+ + a_- u_- = \frac{1}{\sqrt{2}} u_+ + \frac{1}{\sqrt{2}} u_- \quad (4 \text{ 分})$$

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i(E_0 + \Delta E)t/\hbar} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-i(E_0 - \Delta E)t/\hbar} \\ &= e^{-iE_0 t/\hbar} \begin{pmatrix} \cos \Delta E t/\hbar \\ -i \sin \Delta E t/\hbar \end{pmatrix} \quad (4 \text{ 分}) \end{aligned}$$

C. 几率

$$P_{\Phi_1} = \cos^2 \frac{\Delta E}{\hbar} t = \frac{1}{2} (1 + \cos \frac{2\Delta E}{\hbar} t) \quad (2 \text{ 分})$$

(



2分)

IV. (15分)

$$P_{100 \rightarrow 211} = \frac{1}{\hbar} \left| \int_0^\infty \left[\int \psi_{211}^* (\mathbf{ex} E_0 e^{-t/\tau}) \psi_{100} d\mathbf{r} \right] e^{-\omega_{21} t} dt \right|^2 \quad (6 \text{ 分})$$

$$= \frac{e^2 E_0^2}{\hbar^2} \left| \langle \mathbf{R}_{21} | \mathbf{r} | \mathbf{R}_{10} \rangle \right|^2 \left| \int_0^\infty e^{-t(\frac{1}{\tau} - i\frac{3e^2}{8a_0\hbar})} dt \right|^2 \cdot \left| \int \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \mathbf{Y}_{11}^*(\mathbf{Y}_{1-1} - \mathbf{Y}_{11}) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} d\Omega \right|^2$$

(6 分)

$$= \frac{e^2 E_0^2}{6\hbar^2} \left| \langle \mathbf{R}_{21} | \mathbf{r} | \mathbf{R}_{10} \rangle \right|^2 \cdot \frac{1}{\left(\frac{1}{\tau}\right)^2 + \frac{9e^4}{64a_0^2\hbar^2}} \quad (\text{结果正确 3 分})$$

V. (10 分)

第一种做法：取 $\underline{\mathbf{a}}$ 为 $\mathbf{z}$ 轴， $\underline{\mathbf{b}}$ 在 $(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ 平面与 $\underline{\mathbf{a}}$ 夹角为 θ

$$\overline{(\underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}_1)(\underline{\mathbf{b}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}_2)} = \overline{\sigma_{1z}(\sin\theta\sigma_{2x} + \cos\theta\sigma_{2z})} \quad (3 \text{ 分})$$

$$\text{由于 } \sigma_{2x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} (\text{在 } \sigma_{2z} \text{ 表象})$$

$$\sigma_{1z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} (\text{在 } \sigma_{2z} \text{ 表象}) \quad (2 \text{ 分})$$

$$\begin{aligned} \text{则 } \sigma_{2x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \\ \sigma_{2x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \end{aligned} \quad (2 \text{ 分})$$

$$\overline{\sigma_{1z}\sigma_{2x}} = 0, \text{ 而 } \overline{\sigma_{1z}\sigma_{2z}} = -1 \quad (2 \text{ 分})$$

$$\therefore \overline{(\underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}_1)(\underline{\mathbf{b}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}_2)} = -\cos\theta = -\underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\mathbf{b}} \quad (1 \text{ 分})$$

第二种做法：直接求

$$\begin{aligned} \overline{(\underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}_1)(\underline{\mathbf{b}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}_2)} &= \overline{(a_x\sigma_{1x} + a_y\sigma_{1y} + a_z\sigma_{1z})(b_x\sigma_{2x} + b_y\sigma_{2y} + b_z\sigma_{2z})} \\ &= \overline{a_x b_x + \sigma_{1x}\sigma_{2x} + a_x b_y \sigma_{1x}\sigma_{2y} + a_x b_z \sigma_{1x}\sigma_{2z}} \\ &\quad + \overline{a_y b_x \sigma_{1y}\sigma_{2x} + a_y b_y \sigma_{1y}\sigma_{2y} + a_y b_z \sigma_{1y}\sigma_{2z}} \\ &\quad + \overline{a_z b_x \sigma_{1z}\sigma_{2x} + a_z b_y \sigma_{1z}\sigma_{2y} + a_z b_z \sigma_{1z}\sigma_{2z}} \\ &= -a_x b_x - a_y b_y - a_z b_z = -\underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\mathbf{b}} = -\cos\theta \end{aligned}$$

第三种做法: $\overline{(\sigma_1 \cdot \underline{a})(\sigma_2 \cdot \underline{b})} = \overline{(\sigma_1 \cdot \underline{a})[(\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_1) \cdot \underline{b}]}$

$$= -\overline{(\sigma_1 \cdot \underline{a})(\underline{b} \cdot \sigma_1)} + \overline{(\sigma_1 \cdot \underline{a})(\sigma \cdot \underline{b})}$$

$$\underline{\sigma} = \underline{\sigma}_1 + \underline{\sigma}_2$$

而 $\underline{\sigma} = 0$, $\therefore \overline{(\sigma_1 \cdot \underline{a})(\sigma_2 \cdot \underline{b})} = -\overline{(\sigma_1 \cdot \underline{a})(\sigma_1 \cdot \underline{b})}$

$$= -[\underline{a} \cdot \underline{b} + i\sigma_1 \cdot (\underline{a} \times \underline{b})]$$

但 $\underline{\sigma}_1 = 0$, $\therefore \overline{(\sigma_1 \cdot \underline{a})(\sigma_2 \cdot \underline{b})} = -\underline{a} \cdot \underline{b}$

量子力学自测题 (20) 参考答案

一. 回答下列问题 (共 30 分, 第 1、2 小题各 10 分, 第 3、4 小题各 5 分)

1、下列波函数所描写的状态是否为定态? 并说明其理由。

(1)、 $\psi_1(x, t) = \varphi(x)e^{i\frac{E}{\hbar}t} + \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

(2)、 $\psi_2(x, t) = u(x)e^{i(x-\frac{E}{\hbar}t)} + v(x)e^{-i(x+\frac{E}{\hbar}t)}$

答: (1) $\psi_1(x, t)$ 为非定态, 因 $|\psi_1(x, t)|^2 = 2|\varphi(x)|^2 \cos \frac{E}{\hbar}t$ 与 t 有关。 (5 分)

(2) $\psi_2(x, t)$ 为定态, 因 $|\psi_2(x, t)|^2 = |u(x)e^{ix} + v(x)e^{-ix}|^2$ 与 t 无关。 (5 分)

2、描写粒子状态的波函数在坐标表象中为 $\psi(\vec{r}, t)$, 在动量表象中为 $C(\vec{p}, t)$, 在力学量 $\mathbf{Q}$ 表象中为矩阵

$$A(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

且它们都是归一化的, 试指出 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$, $|C(\vec{p}, t)|^2$ 与 $|a_n(t)|^2$ 的物理意义, 并

分别写出用这三个波函数计算力学量 $F(\vec{r}, \vec{p})$ 平均值的表示式。

答: $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ——t 时刻粒子处在位置 $\vec{r}$ 处的概率。 (2 分)

$|c(\vec{p}, t)|^2$ ——t 时刻粒子的动量取 $\vec{p}$ 值的概率。 (2 分)

$|a_n(t)|^2$ ——t 时刻测量粒子的力学量 F, 测得值为其本征值 F_n 的几率。 (2 分)

$$\overline{F} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F}(\vec{r}, \vec{p}) \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} \quad (1 \text{ 分})$$

$$\overline{F} = \int C^*(\vec{p}, t) \hat{F}(i\hbar\nabla_p, \vec{p}) C(\vec{p}, t) d^3\vec{p} \quad (1 \text{ 分})$$

$$\overline{F} = A + FA \quad (2 \text{ 分})$$

3、已知 $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar\vec{L}$, 试问 $\vec{L}_x, \vec{L}_y$ 和 $\vec{L}_z$ 是否一定不能同时测定? 说明其原由或举例说明。

答: 不一定不能同时测定。例如在 $Y_{00}(\theta, \varphi)$ 状态中, $\vec{L}_x, \vec{L}_y$ 和 $\vec{L}_z$ 可同时测定, 它们的测量值为零。 (5 分)

4、量子力学的波函数与经典的波场有何本质性的区别?

答: 量子力学的波函数是一种概率波, 没有直接可测的物理意义, 它的模方表示概率, 才有可测的意义; 经典的波场代表一种物理场, 有直接可测的物理意义。 (5 分)

二、(15 分) 在动量表象中, 求线性谐振子的能量本征函数

Solve:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$$

在动量表象中
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\mu\omega^2 \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu}p^2 \quad (2 \text{ 分})$$

本征方程:
$$\left[-\frac{\mu^2\omega^2\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu}p^2 \right] \psi(p) = E\psi(p) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\frac{\mu^2\omega^2\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} \psi(p) + \left(E - \frac{1}{2\mu}p^2 \right) \psi(p) = 0$$

令
$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{\mu\omega\hbar}} \quad \lambda = \frac{2E}{\omega\hbar} \quad \xi = \alpha p$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0$$

该方程在 $-\infty < \xi < \infty$ 区域上存在有限解的条件是要求

$$\lambda = 2n + 1$$

$$\therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (3 \text{ 分})$$

本征函数: $\psi_n(p) = N_n e^{-\frac{\alpha^2}{2} p^2} H_n(\alpha p) \quad (5 \text{ 分})$

归一化常数: $N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{1/2} \quad (2 \text{ 分})$

即
$$\psi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!} \sqrt{\omega \mu \hbar}} e^{-\frac{p^2}{2\omega \mu \hbar}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{\omega \mu \hbar}}\right)$$

二、(15 分) 在动量表象中, 求线性谐振子的能量本征函数

Solve:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$$

在动量表象中
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \mu \omega^2 \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu} p^2 \quad (2 \text{ 分})$$

本征方程:
$$\left[-\frac{\mu^2 \omega^2 \hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2\mu} p^2 \right] \psi(p) = E \psi(p) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\frac{\mu^2 \omega^2 \hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dp^2} \psi(p) + \left(E - \frac{1}{2\mu} p^2 \right) \psi(p) = 0$$

令
$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{\mu\omega\hbar}} \quad \lambda = \frac{2E}{\omega\hbar} \quad \xi = \alpha p$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) + (\lambda - \xi^2)\psi(\xi) = 0$$

该方程在 $-\infty < \xi < \infty$ 区域上存在有限解的条件是要求 $\lambda = 2n+1$

$$\therefore E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (3 \text{ 分})$$

$$\text{本征函数: } \psi_n(p) = N_n e^{-\frac{\alpha^2}{2}p^2} H_n(\alpha p) \quad (5 \text{ 分})$$

$$\text{归一化常数: } N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{1/2} \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{即 } \psi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!} \sqrt{\omega \mu \hbar}} e^{-\frac{p^2}{2\omega \mu \hbar}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{\omega \mu \hbar}}\right)$$

$$\text{能量一级修正: } E_1^{(1)} = H'_{11} = b \quad E_2^{(1)} = b \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{能量二级修正: } E_1^{(2)} = \sum_m' \frac{|H'_{m1}|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (2 \text{ 分})$$

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{能量二级近似: } E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = E_2^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

设 $\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_2^{(0)}$ 为零级近似波函数, 则波函数一级近似

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m1}}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_1^{(0)} + \frac{a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

$$\psi_2 = \psi_2^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m2}}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_2^{(0)} + \frac{a}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

α

直接计算: 设 $\hat{H}$ 的本征矢为 (β) , 本征值为 E , 则本征方程为:

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b & a \\ a & E_2^{(0)} + b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{欠期方程: } \begin{vmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3 \text{ 分})$$

$$(E_1^{(0)} + b - E)(E_2^{(0)} + b - E) - a^2 = 0$$

$$E^2 - E(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) + [(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) - a^2] = 0$$

$$E = \frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \sqrt{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b)^2 - 4(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) + 4a^2}}{2}$$

$$\text{能量一级修正: } E_1^{(1)} = H'_{11} = b \quad E_2^{(1)} = b \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{能量二级修正: } E_1^{(2)} = \sum_m' \frac{|H'_{m1}|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (2 \text{ 分})$$

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{能量二级近似: } E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = E_2^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

设 $\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_2^{(0)}$ 为零级近似波函数, 则波函数一级近似

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m1}}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_1^{(0)} + \frac{a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

$$\psi_2 = \psi_2^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{m2}}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \psi_2^{(0)} + \frac{a}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} \quad (3 \text{ 分})$$

直接计算: 设 $\hat{H}$ 的本征矢为 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, 本征值为 E , 则本征方程为:

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b & a \\ a & E_2^{(0)} + b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{欠期方程: } \begin{vmatrix} E_1^{(0)} + b - E & a \\ a & E_2^{(0)} + b - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3 \text{ 分})$$

$$(E_1^{(0)} + b - E)(E_2^{(0)} + b - E) - a^2 = 0$$

$$E^2 - E(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) + [(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) - a^2] = 0$$

$$E = \frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \sqrt{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b)^2 - 4(E_1^{(0)} + b)(E_2^{(0)} + b) + 4a^2}}{2}$$

$$= \frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \sqrt{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2 + 4a^2}}{2}$$

$$= \frac{1}{2} \left[(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm (E_1^{(0)} - E_2^{(0)}) \sqrt{1 + \left(\frac{2a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right)^2} \right]$$

$$= \frac{1}{2} (E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + 2b) \pm \frac{1}{2} (E_1^{(0)} - E_2^{(0)}) \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{2a}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right)^2 + \dots \right] \quad (2 \text{ 分})$$

$$E_1 \approx E_1^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

$$E_2 \approx E_2^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \quad (1 \text{ 分})$$

可见, 用直接解能量算符本征方程的方法, 求得的本征能量值在泰勒级数展开的二级近似下与微扰法得到的能量二级近似值一致

五. (14 分) 一体系由三个全同玻色子组成, 玻色子之间无相互作用。玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个? 它们的玻函数怎样用单粒子态构成?

解: 体系的可能状态有 4 个: (2 分)

$$\Phi_1(q_1, q_2, q_3) = \varphi_i(q_1)\varphi_i(q_2)\varphi_i(q_3) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\Phi_2(q_1, q_2, q_3) = \varphi_j(q_1)\varphi_j(q_2)\varphi_j(q_3) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\Phi_3(q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_i(q_1)\varphi_i(q_2)\varphi_j(q_3) + \varphi_i(q_2)\varphi_i(q_3)\varphi_j(q_1) + \varphi_i(q_3)\varphi_i(q_1)\varphi_j(q_2)] \quad (3 \text{ 分})$$

$$\Phi_3(q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_i(q_1)\varphi_j(q_2)\varphi_j(q_3) + \varphi_i(q_2)\varphi_j(q_3)\varphi_j(q_1) + \varphi_i(q_3)\varphi_j(q_1)\varphi_j(q_2)]$$

量子力学自测题 (21)

1、已知一维运动的粒子在态 $\psi(x)$ 中坐标 x 和动量 p_x 的平均值分别为 x_0 和 p_0 ,

求在态 $\varphi(x) = e^{-ip_0x/\hbar}\psi(x+x_0)$ 中坐标 x 和动量 p_x 的平均值。

解：已知粒子在态 $\psi(x)$ 中坐标 x 和动量 p_x 的平均值分别为

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)x\psi(x)dx = x_0 \\ \overline{p_x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)dx = p_0\end{aligned}$$

现粒子处在 $\varphi(x)$ 态, 坐标 x 和动量 p_x 的平均值

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)x\varphi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x+x_0)x\psi(x+x_0)dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x')(x'-x_0)\psi(x')dx' = x_0 - x_0 = 0 \\ \overline{p_x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip_0x/\hbar}\psi^*(x+x_0)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)[e^{-ip_0x/\hbar}\psi(x+x_0)]dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip_0x/\hbar}\psi^*(x+x_0)[-p_0e^{-ip_0x/\hbar}\psi(x+x_0) + e^{-ip_0x/\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x+x_0)]dx \\ &= -p_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi(x')dx' = -p_0 + p_0 = 0\end{aligned}$$

2、一体系服从薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}k|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2\right]\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

(1) 指出体系的所有守恒量 (不必证明);

(2) 求基态能量和基态波函数。

解：(1) 体系的哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}k|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2$$

引入质心坐标 $\vec{R}$ 和相对坐标 $\vec{r}$: $\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

在坐标变换 $\vec{r}_1, \vec{r}_2 \Rightarrow \vec{R}, \vec{r}$ 下, 体系的哈密顿量变为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2}kr^2 \quad M = 2m \quad \mu = m/2$$

容易得知系统的守恒量为 E, L^2, L_z 。(中心力场)

(2) 相对运动哈密顿量为

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{1}{2}kr^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

相对运动为三维各向同性谐振子, 基态能量和波函数为

$$E_N = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad \psi(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

3、设 $t=0$ 时氢原子处在态

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{10}}[2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}]$$

(1) 求体系能量的平均值; (2) 任意 t 时刻波函数 $\psi(\vec{r}, t)$; (3) 任意 t 时刻

体系处在 $l=1, m=1$ 态的几率; (4) 任意 t 时刻体系处在 $m=0$ 态的几率。

解: 氢原子定态能量和波函数为

$$E_n = -\frac{e^2}{2an^2} \quad \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$(1) \quad \bar{E} = \frac{2}{5}E_1 + \frac{3}{5}E_2 = -\frac{11e^2}{40a}$$

(2) 任意 t 时刻波函数

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{10}}\{2e^{-iE_1t/\hbar}\psi_{100}(\vec{r}) + e^{-iE_2t/\hbar}[\psi_{210}(\vec{r}) + \sqrt{2}\psi_{211}(\vec{r}) + \sqrt{3}\psi_{21-1}(\vec{r})]\}$$

(3) 任意 t 时刻体系处在 $l=1, m=1$ 态的几率为 $1/5$;

(4) 任意 t 时刻体系处在 $m=0$ 态的几率为 $1/2$ 。

4、一维谐振子受到微扰 $H' = cx^2$ 作用, 式中 c 为常数。在粒子数表象中,

$$x = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a + a^+)$$

a, a^+ 分别为湮灭算符和产生算符, 满足

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

- (1) 用微扰论求准确到二级近似的能量值;
 (2) 求能量的准确值, 并与微扰论给出的结果相比较。

解: (1) 由 $[a, a^+] = 1$ 得

$$H' = cx^2 = \frac{c\hbar}{2\mu\omega} (a + a^+)^2 = \frac{c\hbar}{2\mu\omega} [a^2 + (a^+)^2 + 1 + 2a^+a]$$

利用 $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ 计算微扰矩阵元得

$$\begin{aligned} H'_{mn} &= \langle m | H' | n \rangle = \frac{c\hbar}{2\mu\omega} \langle m | [a^2 + (a^+)^2 + 1 + 2a^+a] | n \rangle \\ &= \frac{c\hbar}{2\mu\omega} \{ \sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{mn} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} \} \end{aligned}$$

零级近似能量、一级和二级修正能量分别为

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad E_n^{(1)} = H'_{nn} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{c\hbar}{\mu\omega}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{c^2\hbar}{8\mu^2\omega^3} [n(n-1) - (n+1)(n+2)] = -\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{c^2\hbar}{2\mu^2\omega^3}$$

精确到二级近似的能量值为 $E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \left(1 + \frac{c}{\mu\omega^2} - \frac{c^2}{2\mu^2\omega^4} \right)$

(2) 现求能量精确值

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + cx^2 = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 x^2$$

$$\omega_0 = \sqrt{\omega^2 + \frac{2c}{\mu}} = \omega \left(1 + \frac{2c}{\mu\omega^2} \right)^{1/2}$$

本征能量

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \left(1 + \frac{2c}{\mu\omega^2} \right)^{1/2} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega (1 + \lambda)^{1/2}$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad \lambda = \frac{2c}{\mu\omega^2}$$

视 λ 为微小量, 则

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \left(1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots\right) = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots$$

$$\text{其中} \quad E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad E_n^{(1)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{c \hbar}{\mu \omega}$$

$$E_n^{(2)} = -\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{c^2 \hbar}{2 \mu^2 \omega^3}$$

能量精确解的前三项与分别与零级近似能量、一级和二级修正能量相同。

5、设 a, a^+ 分别为湮灭算符和产生算符, 满足对易关系 $[a, a^+] = 1$ 。体系的哈密顿量为

$$H = Aaa + Ba^+a^+ + Ca^+a + D$$

(1) 问 A, B, C, D 满足什么条件 H 才是厄密算符? (2) 求体系的能量。

解: (1) 容易得知 H 是厄密算符的条件是 A, B, C, D 均为实数, 且 $A = B$, 则

$$H = A[a^2 + (a^+)^2] + Ca^+a + D \quad (1)$$

(2) 由 (1) 式得

$$\frac{C}{A}a^+a + a^2 + (a^+)^2 = \frac{1}{A}(H - D) \quad (2)$$

令 $b = \lambda a + \gamma a^+ \quad b^+ = \lambda a^+ + \gamma a$ 其中 λ, γ 为待定实数

$$[b, b^+] = [\lambda a + \gamma a^+, \lambda a^+ + \gamma a] = \lambda^2[a, a^+] + \gamma^2[a^+, a]$$

已知 $[a, a^+] = 1$ 则得 $[b, b^+] = \lambda^2 - \gamma^2$

为使 b, b^+ 与 a, a^+ 满足相同的对易关系 $[b, b^+] = 1$ 则 $\lambda^2 - \gamma^2 = 1$

计算 $b^+b = (\lambda a^+ + \gamma a)(\lambda a + \gamma a^+) = \lambda^2 a^+a + \lambda\gamma[a^2 + (a^+)^2] + \gamma^2 aa^+$

利用 $[a, a^+] = 1 \quad aa^+ = 1 + a^+a$

得 $b^+b = (\lambda^2 + \gamma^2)a^+a + \lambda\gamma[a^2 + (a^+)^2] + \gamma^2$

所以 $\frac{\lambda^2 + \gamma^2}{\lambda\gamma}a^+a + a^2 + (a^+)^2 = \frac{1}{\lambda\gamma}(b^+b - \gamma^2) \quad (3)$

比较 (2) 式和 (3) 式, 如令 $\frac{\lambda^2 + \gamma^2}{\lambda\gamma} = \frac{C}{A}$ 则得

$$\frac{1}{A}(H - D) = \frac{1}{\lambda\gamma}(b^+b - \gamma^2)$$

由此可得 $H = \frac{A}{\lambda\gamma}(b^+b - \gamma^2) + D$ (4)

如果已知 λ, γ , 则 H 的本征值为

$$E_n = \frac{A}{\lambda\gamma}(n - \gamma^2) + D \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

现在来求 λ, γ , 由于 $\lambda^2 - \gamma^2 = 1$ $\frac{\lambda^2 + \gamma^2}{\lambda\gamma} = \frac{C}{A}$ 解之得

$$\lambda = \sqrt{\frac{C + \sqrt{C^2 - 4A^2}}{2\sqrt{C^2 - 4A^2}}} \quad \gamma = \sqrt{\frac{C - \sqrt{C^2 - 4A^2}}{2\sqrt{C^2 - 4A^2}}}$$

$$\lambda\gamma = \frac{A}{\sqrt{C^2 - 4A^2}}$$

所以 $E_n = \sqrt{C^2 - 4A^2} \left(n - \frac{C - \sqrt{C^2 - 4A^2}}{2\sqrt{C^2 - 4A^2}} \right) + D \quad C > 2A$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

量子力学自测题 (22) 参考答案

1、(a), (b) 各 10 分

(a) 能量有确定值。力学量 (不显含 t) 的可能测值及概率不随时间改变。

(b) $(n \mid m \mid m_s) \rightarrow (n' \mid l' \mid m' \mid m'_s)$

选择定则: $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1, \Delta m_s = 0$

根据: 电矩 m 矩阵元 $\vec{e} r_{n' l' m' m'_s, n l m m_s} \neq 0$

2、(a) 6 分 (b) 7 分 (c) 7 分

(a) $\hat{K}$ 是厄米算符, 所以其本征值必为实数。

(b) $\hat{F} |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle, \langle \Psi | \hat{F} = \lambda \langle \Psi |$

$$\begin{aligned}\overline{K} &= \langle \Psi | \hat{K} | \Psi \rangle = i \langle \Psi | \hat{F} \hat{G} - \hat{G} \hat{F} | \Psi \rangle \\ &= i \lambda \{ \langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle \} = 0\end{aligned}$$

$$(c) (\hat{F} + i\hat{G})(\hat{F} - i\hat{G}) = \hat{F}^2 + \hat{G}^2 - \hat{K}$$

$$\langle \Psi | (\hat{F} + i\hat{G})(\hat{F} - i\hat{G}) | \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{F} - i\hat{G}) | \Psi \rangle^2 \geq 0$$

$$\therefore \langle \hat{F}^2 + \hat{G}^2 - \hat{K} \rangle \geq 0, \text{ 即 } \overline{F^2 + G^2} \geq \overline{K}$$

3、(a), (b) 各 10 分

$$(a) \hat{H} = \omega \hat{S}_z + \nu \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \omega \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \frac{\hbar}{2} \nu \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \nu & -\omega \\ \omega & -\nu \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}\hat{H} \Psi &= E \Psi, \quad \Psi = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \quad \text{令 } E = \frac{\hbar}{2} \lambda, \quad \text{则} \\ \omega - \lambda & \quad \nu & \quad a & \quad \omega - \lambda & \quad \nu \\ \begin{bmatrix} \nu & -\omega - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} &= 0, \quad \begin{vmatrix} \nu & -\omega - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \omega^2 - \nu^2 = 0\end{aligned}$$

$$\lambda = \pm \sqrt{\omega^2 + \nu^2}, \quad E_1 = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega^2 + \nu^2}, \quad E_2 = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega^2 + \nu^2}$$

$$\text{当 } \omega \gg \nu, \quad \sqrt{\omega^2 + \nu^2} = \omega \left(1 + \frac{\nu^2}{\omega^2}\right)^{1/2} \approx \omega \left(1 + \frac{\nu^2}{2\omega^2}\right) = \omega + \frac{\nu^2}{2\omega}$$

$$E_1 \approx -\frac{\hbar}{2} \left[\omega + \frac{\nu^2}{2\omega}\right], \quad E_2 = \frac{\hbar}{2} \left[\omega + \frac{\nu^2}{2\omega}\right]$$

$$(b) \hat{H} = \omega \hat{S}_z + \nu \hat{S}_x = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}_0 = \omega \hat{S}_z, \quad \hat{H}' = \nu \hat{S}_x$$

$$\hat{H}_0 \text{ 本征值为 } \pm \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad \text{取 } E_1^{(0)} = -\frac{1}{2} \hbar \omega, \quad E_2^{(0)} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

$$\text{相当本征函数 (S}_z \text{表象) 为 } \Psi_1^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \Psi_2^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

则 $\hat{H}'$ 之矩阵元 (S_z 表象) 为

$$H'_{11} = 0, \quad H'_{22} = 0, \quad H'_{12} = H'_{21} = \frac{1}{2} \hbar \nu$$

$$E_1 = E_1^{(0)} + H'_{11} + \frac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = -\frac{1}{2} \hbar \omega + 0 - \frac{\frac{1}{4} \hbar^2 \nu^2}{\hbar \omega} = -\frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{1}{4} \frac{\hbar \nu^2}{\omega}$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + H'_{22} + \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{1}{4} \frac{\hbar \nu^2}{\omega}$$

$$4、E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad \psi_1(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} & 0 < x < a \\ 0 & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

$$\int_0^a \psi_1^2 x dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{a}{2}$$

$$p_x = -i\hbar \int_0^a \psi_1 \frac{d}{dx} \psi_1 dx = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a d\left(\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\pi x}{a}\right) = 0$$

$$xp_x = -i\hbar \int_0^a \psi_1 x \frac{d}{dx} \psi_1 dx = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a x \sin \frac{\pi x}{a} d\left(\sin \frac{\pi x}{a}\right)$$

$$= -i\hbar \frac{1}{a} \int_0^a x d\left(\sin^2 \frac{\pi x}{a}\right)$$

$$= -i\hbar \frac{1}{a} \left[x \sin^2 \frac{\pi x}{a} \right]_0^a - \int_0^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx$$

$$= 0 + \frac{i\hbar}{2} \int_0^a \psi_1^2 dx = \frac{i\hbar}{2}$$

四项各 5 分

5、(i), (ii) 各 10 分

(i) $s=0$, 为玻色子, 体系波函数应交换对称。

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ 有: $\psi_a(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2), \psi_b(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2), \psi_c(\vec{r}_1) \psi_c(\vec{r}_2),$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) + \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2)]$$

a	c	c	a
b	c	c	b

共 6 种。

(ii) $s=\frac{1}{2}$, 单粒子态共 6 种:

$$\psi_a \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \psi_a \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \psi_b \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \psi_b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \psi_c \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \psi_c \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

任取两个, 可构成体系 (交换) 反对称态, 如

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_a(\vec{r}_1) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \psi_b(\vec{r}_2) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 - \psi_b(\vec{r}_1) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \psi_a(\vec{r}_2) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) - \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2)] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2$$

体系态共有 $C_6^2 = 15$ 种

或: ψ_a, ψ_b, ψ_c 三种轨道态任取两个, 可构成一种轨道对称态

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) + \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2)] \quad \text{及} \quad \text{一种反对称态}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) - \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2)], \text{前者应与自旋单态 } \chi_{00} \text{ 相乘, 而构成体系反对}$$

称态，共 3 种。后者应与自旋三重态 x_{11} , x_{10} , x_{1-1} 相乘而构成体系反对称态，共 $3 \times 3 = 9$ 种。

但轨道对称态还有 $\psi_a(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2)$ 型，共 3 种型，各与自旋单态配合，共 3 种体系态，故体系态共 $3+3+9=15$ 种。